

Octávio Junqueira

Representação da fase geométrica por
monopolos: uma generalização em
dimensões arbitrárias

Niterói-RJ
2016

Octávio Junqueira

Representação da fase geométrica por
monopolos: uma generalização em dimensões
arbitrárias

Dissertação apresentada ao Instituto de
Física da Universidade Federal Flumi-
nense - UFF, para obtenção do título
de mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. L. E. Oxman



INSTITUTO DE FÍSICA
Universidade Federal Fluminense

Niterói-RJ
2016

J95 Junqueira, Octávio.

Representação da fase geométrica por monopolos : uma generalização em dimensões arbitrárias / Octávio Junqueira ; orientador: Luis Esteban Oxman -- Niterói, 2016.
90 p. : il.

Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal Fluminense, Instituto de Física, Niterói, 2016.

Bibliografia: p. 87-89.

1.FASE GEMÉTRICA NA FÍSICA. 2.VETOR DE BLOCH. 3.TEORIA DE YANG-MILLS. I. Esteban Oxman, Luis, Orientador. II.Universidade Federal Fluminense. Instituto de Física, Instituição responsável. III.Título.

CDD 537.67

*Evites preocupações vãs. Atrás de ti,
há um abismo de tempo; na tua frente,
um infinito.*

Marco Aurélio, *Meditações*, IV

Agradecimentos

Agradeço a Deus por todas as pessoas especiais que passaram pela minha vida. Algumas já não se encontram entre nós, e deixaram imensas saudades.

Agradeço a todos do Instituto pela cooperação e cuidado. É sempre bom encontrar os companheiros e companheiras de graduação que continuam nas pesquisas, animados com novas ideias que levam a Física adiante, sempre me dando bons conselhos quando nos cruzamos pelo caminho.

Sou grato, em particular, ao professor A. Z. Khoury e a Gustavo Simões pelas ricas discussões ao longo de todo o curso, que foram de suma importância para o desenvolvimento da tese. Sem elas, esta tese perderia muito.

Ao professor L. E. Oxman pela dedicada orientação ao longo destes dois anos, sem a qual nada teria sido feito. Quando me propunha desenvolver algum cálculo ou conceito, e as minhas ideias por vezes se dispersavam, sempre me apontou a melhor direção, aliando os cálculos com a busca de uma compreensão mais ampla e objetiva da Física envolvida, – lição que jamais esquecerei.

Por fim, ao CNPq pelo suporte financeiro ao longo do mestrado. Apesar das crises, torcemos para que continue apoiando as gerações futuras, porque o país precisa.

Resumo

Como é bem sabido, quando uma partícula de spin $1/2$ realiza uma evolução cíclica, devido à interação com um campo magnético, o estado quântico ganha, além da fase dinâmica, uma fase de origem geométrica. Este interessante fenômeno foi inicialmente apontado por Michael Berry, sendo um comportamento geral para sistemas de N níveis que evoluem segundo a variação adiabática dos parâmetros externos. Posteriormente, a geração de uma fase geométrica, invariante de calibre e por reparametrizações, foi estendida a situações onde o estado realiza uma evolução não necessariamente adiabática, nem cíclica.

Sabemos ainda que, no caso de spin $1/2$, ou em sistemas de dois níveis em geral, a fase geométrica pode ser interpretada como a área encerrada pelo caminho que o vetor de estado – ou vetor de Bloch – percorre sobre a esfera de Bloch, e que o efeito pode ser associado à presença de um monopolo. Nesta tese, procuramos generalizar estes aspectos para um sistema de N níveis, buscando compreender que objetos fariam um papel análogo ao vetor de Bloch.

Para tal fim, a utilização de conceitos próprios das teorias de calibre não-abelianas foi fundamental. Em suma, a solução foi a seguinte: os análogos do vetor de Bloch são gerados por meio de uma transformada dos geradores de Cartan correspondentes ao subgrupo de evoluções $SU(N)$ do sistema, enquanto que a fase geométrica pode ser representada por monopolos que atuam sobre o espaço projetivo de estados.

Palavras-chave: Fase geométrica, Vetor de Bloch, Teorias de calibre não-abelianas, Monopolos.

Abstract

It is well known that when a spin $1/2$ state performs a cyclic evolution, driven by a magnetic field, the quantum state gains a geometric phase, besides the usual dynamical phase. This interesting phenomenon was first noted by Michael Berry, being a general behavior for N -level systems that evolve under the adiabatic variation of external parameters. Later, the geometric phase, a gauge and reparametrization invariant object, was extended to evolutions that are neither adiabatic nor cyclic.

In the spin $1/2$ case, or two-level systems in general, we also know that the geometric phase may be interpreted as the area enclosed by the path that the state vector - or Bloch vector - describes over the Bloch sphere, and that this effect may be represented as a monopole-like contribution. In this thesis, we generalize these aspects to N -levels systems, trying to understand what object would play a role analogous to the Bloch vector.

For this aim, the use of key concepts borrowed from non-Abelian gauge theories was essential. In short, the solution is as follows: the Bloch vector analogues correspond to Cartan generators transformed under the adjoint action of the subgroup of $SU(N)$ evolutions, while the geometric phase may be represented by monopoles acting on the projective space of states.

Key-words: Geometric phase, Bloch vector, Non-Abelian gauge theories, Monopoles.

Sumário

1	Introdução	10
2	Natureza dos processos adiabáticos na física quântica	13
2.1	Os princípios fundamentais: o teorema adiabático e a fase geométrica	13
2.2	A reparametrização da fase de Berry e a invariância de gauge .	19
3	Do caso particular de uma partícula de spin 1/2 para uma evolução U(2) geral	20
3.1	Uma partícula de spin $\frac{1}{2}$ sob a ação de um campo magnético que evolui adiabaticamente	20
3.2	A generalização da fase geométrica para um qubit via formalismo de Mukunda-Simon	24
3.3	Relação de equivalência, teorema da partição e subgrupo de estabilidade	28
3.4	Análise topológica: o primeiro e o segundo grupos de homotopia	31
3.5	O espaço projetivo e o subgrupo de estabilidade da fase geométrica de um qubit	33
4	Comportamento da fase geométrica para as evoluções SU(2)	36
4.1	Das evoluções descritas por hamiltonianos pertencentes à álgebra SU(2)	36
4.2	A fase geométrica de um qubit e o papel do vetor de Bloch . .	38
5	Aspectos algébricos da fase geométrica via decomposição de evoluções SU(N)	40
5.1	A parametrização canônica dos <i>cosets</i> da decomposição de um grupo SU(N)	40
5.2	Invariância da física concernente à fase geométrica para um sistema de N níveis	44
5.3	Os análogos do vetor de Bloch em $N^2 - 1$ dimensões	49
5.4	A estrutura algébrica da fase via fatorização das evoluções infinitesimais	51
5.5	A estrutura algébrica da fase via decomposição de evoluções cíclicas	58
6	Uma interpretação geométrica generalizada da fase no espaço de estados	61
6.1	Interpretações da fase geométrica em espaços topologicamente triviais	61

6.2	Redução da fase geométrica a um único ângulo sólido para um sistema de N níveis	69
7	A generalização da fase geométrica para um sistema de N níveis	77
7.1	As evoluções cíclicas e o tensor densidade de campo não-abeliano	77
7.2	Representação da fase geométrica por monopolos das teorias de Yang-Mills	79
8	Conclusões	84

1 Introdução

Desde que M. V. Berry publicou seu trabalho sobre evoluções adiabáticas em sistemas quânticos [1], em 1984, muitos esforços têm sido feitos no sentido de estender os conceitos da teoria para fenômenos cada vez mais amplos. A fase estudada por Berry foi inspirada na fase de Pancharatnam, introduzida por S. Pancharatnam em 1956, no seu estudo de efeitos de interferência envolvendo luz polarizada [2]. Até então, a fase adquirida por um estado quântico era tratada de forma secundária, como um fator que não contribuía para a probabilidade de se medir uma grandeza física, em outras palavras, não podia ser observada no mundo real.

Sabemos que a evolução temporal do estado da partícula em processos adiabáticos reduz-se a uma fase, que pode ser dividida em duas fases que possuem naturezas distintas: a fase geométrica e a fase dinâmica. No seu trabalho, Berry estudou a fase acumulada pelo sistema em evoluções cíclicas. Com os resultados obtidos, ele interpretou o efeito Aharonov-Bohm [3] sob a ótica da fase geométrica adquirida por estados quânticos em evoluções adiabáticas cíclicas, a conhecida fase de Berry.

A fase de Berry é genérica, e depende do caminho escolhido para percorrer o ciclo em qualquer sistema. Esclarece-se, neste ponto, a relação entre os efeitos ópticos e a topologia do espaço. Y. Aharonov e J. Anandan [4] generalizaram a fase geométrica para evoluções não necessariamente adiabáticas. Mais recentemente, N. Mukunda e R. Simon [5, 6] trataram o problema de acordo com esta generalização, a partir de um formalismo da fase geométrica muito útil para o estudo das invariâncias de gauge e aspectos topológicos que caracterizam os estados.

Quando uma partícula de spin $\frac{1}{2}$ interage adiabaticamente com um campo magnético, a fase geométrica pode ser interpretada como a metade do ângulo sólido subentendido pelo caminho descrito pelas componentes do campo. Interpretações análogas são obtidas para partículas de spin arbitrário: no caso mais geral, a fase é dada pelo ângulo sólido multiplicado pelo spin da partícula. Seguindo as ideias de Berry, muitos experimentos foram realizados na intenção de medir a fase geométrica em variados contextos, que obtiveram grande êxito.

Em um artigo publicado em 1988 [7], o próprio Berry apresentou três destes experimentos que comprovavam a realidade da fase geométrica: em um deles, T. Bitter e D. Dubers perceberam que o sentido dos spins de neutrons colimados em um feixe coincidem com os seus momentos magnéticos, que são responsáveis por rodar o feixe ao interagir com um campo magnético helicoidal. A fase geométrica foi medida em função do deslocamento do eixo dos spins dos neutrons, concordando com a teoria. Em um segundo experi-

mento, Y. Chiao, Yong-shi Wu e Akira Tomita observaram que a rotação da direção de polarização de um feixe colimado de luz em fibra ótica também prediz a fase geométrica. Por último, Robert Tycko elaborou um experimento com núcleos excitados de cloro, no qual os spins eram rotados em um cristal que emitia sinais de rádio cujo deslocamento de fase foi calculado pela fase geométrica acumulada pelos núcleos. A concordância entre a teoria e o experimento de Tycko é quase exata. Tudo isso demonstra que a fase geométrica, mesmo no limite adiabático, é comumente encontrada na natureza.

A interpretação geométrica da interação da partícula de spin $\frac{1}{2}$ com o campo magnético pode ser generalizada para evoluções unitárias cíclicas de qubits. O emaranhamento de qubits que evoluem por uma fase foi analisado por E. Sjöqvist em [8, 9]. P. Milman e R. Mosseri [10, 11] investigaram a fase geométrica e a estrutura topológica de estados puros de um par de qubits emaranhados. Esta estrutura foi comprovada por um experimento realizado com lasers [12], seguindo um modelo spin-órbita, e outro com ressonância magnética nuclear [13].

Recentemente, experimentos para a observação de múltiplos qubits foram propostos no ref. [14]. L. E. Oxman e A. Z. Khoury [15] apresentaram uma generalização da fase topológica de um par de qubits emaranhados para estados com mais dimensões, com ilustrações de exemplos numéricos de um sistema de dois qutrits e outro de um par qubit-qutrit. No caso de estados separáveis, em evoluções cíclicas, verificou-se que a fase geométrica recai no ângulo sólido, analogamente ao caso de um único qubit. Para estados maximalmente emaranhados, a generalização encontra a fase geométrica $e^{i\pi}$, de acordo com os experimentos [12, 13], citados acima.

Como podemos perceber, muitos pesquisadores têm se debruçado sobre o problema da extensão da teoria, partindo do caso mais simples conhecido: o sistema de uma partícula de dois níveis, ou seja, o qubit. A generalização para um sistema de três níveis foi investigada [16, 17, 18]. Na última década, esta busca foi impulsionada, em grande parte, pela demonstração de que deslocamentos de fase geométrica podem ser usados na computação quântica [19, 20, 21], em circuitos quânticos que operam com poucos qubits. O esforço agora consiste em ampliar o entendimento da física envolvida, com a expectativa de que sistemas mais complexos possam ser manipulados e aplicados no desenvolvimento da computação quântica.

Neste trabalho, buscamos compreender a fase geométrica adquirida pelo estado em um sistema de nível arbitrário, com foco especial para os sistemas de dois e três níveis. Na seção 2, introduziremos os princípios básicos da teoria, elucidando os conceitos com um exemplo elementar, que nos ajudará a entender os processos adiabáticos em sistemas quânticos, além de discutirmos a invariância de gauge produzida neste regime. Na seção 3, generalizaremos

a fase geométrica para processos não necessariamente adiabáticos, segundo o formalismo de Mukunda-Simon, e, com isso, estudaremos a fase para uma evolução geral de um qubit. Ainda nesta seção, interpretaremos a geometria da fase no espaço de estados, seguindo os passos do caso da interação de uma partícula de spin $\frac{1}{2}$ com um campo magnético, caracterizando a topologia de um sistema de dois níveis.

Na seção 4, estudaremos uma forma da fase geométrica de um qubit, escrita em função do vetor de Bloch. Será exatamente esta forma que nos indicará o caminho para entendermos melhor a fase em um sistema de N níveis, quando buscaremos análogos do vetor de Bloch que farão o mesmo papel em níveis superiores. Já na seção 5, por meio da decomposição em matrizes unitárias da evolução temporal, discutiremos a invariância da física de uma forma mais ampla, com algumas ideias oriundas da invariância de gauge, além de estudarmos a estrutura algébrica das evoluções infinitesimais e cíclicas, à luz das álgebras de Lie.

Em sequência, na seção 6, apresentaremos uma interpretação geométrica generalizada da fase de Berry para um sistema de N níveis, de acordo com uma expressão final que nos será útil para visualizar os objetos geométricos produzidos no espaço de estados, e em que condições ângulos sólidos são projetados. Por fim, na seção 7, generalizaremos a fase para um sistema de N níveis utilizando o tensor densidade de campo não-abeliano, que possibilitará reconhecer puros calibres que não contribuem para a fase, buscando um formalismo análogo ao da fase de um qubit descrita pelo vetor de Bloch, como foi dito anteriormente. As soluções serão puramente analíticas, partindo unicamente do princípio de que estados quânticos evoluem no tempo por matrizes unitárias, sem tomar um hamiltoniano em particular.

2 Natureza dos processos adiabáticos na física quântica

2.1 Os princípios fundamentais: o teorema adiabático e a fase geométrica

Considerando os autoestados de energia do hamiltoniano de um sistema não-dinâmico $H \neq H(t)$, ao imaginarmos um sistema que se encontra inicialmente em um destes autoestados, o teorema adiabático garante que, quando o hamiltoniano varia adiabaticamente, os novos estados serão, a cada instante, autoestados do hamiltoniano instantâneo $H(t)$, calculados agora sobre os novos valores dos parâmetros que variam [22, 23]. De um certo ponto de vista, o argumento do teorema é *classicamente* lógico. Ele admite que a configuração do sistema não é abalada em um processo adiabático, isto é, quando as mudanças da configuração ocorrem gradualmente, tendo em mente a analogia com processos adiabáticos na termodinâmica. Porém, apesar de lógica em alguns casos, a analogia com a física clássica nem sempre é possível.

Quando pretendemos transpor conceitos da física clássica para a mecânica quântica, todo cuidado é pouco. Na termodinâmica, um processo é dito adiabático quando não ocorre troca de calor entre o sistema e o ambiente, podendo, em todo caso, ocorrer variação térmica. O conceito de ausência de troca de calor é um conceito muito amplo. Qual seria, portanto, o conceito físico que define um processo como sendo adiabático no mundo quântico, isto é, no qual o teorema adiabático é válido?

Para responder esta pergunta, escolhemos analisar um exemplo básico: uma partícula confinada em um poço quadrado infinito unidimensional em que uma das barreiras desloca-se com uma velocidade constante \vec{u} relativamente pequena, caracterizando um processo lento e gradual. – Aqui, devemos perguntar: lento em relação ao quê? – Este é o cerne da questão. As pessoas podem dizer que a velocidade do planeta ao redor do Sol é muito grande, porém, em comparação à velocidade de uma partícula relativística, sabemos que esta velocidade é desprezível. Em razão disto, buscaremos uma interpretação mais ampla cuja base de comparação será a relação entre a taxa de variação do hamiltoniano e as energias acessíveis ao sistema.

Inicialmente, devemos considerar o hamiltoniano do sistema não-dinâmico, com $\vec{u} = 0$: neste caso, tomando a configuração do sistema no instante $t = 0$

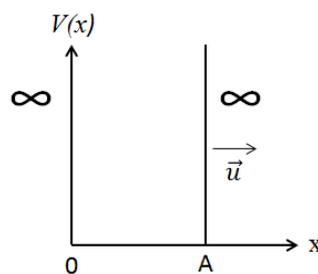


Figura 1: poço infinito

dada pela largura do poço $A(0) = A$, a equação de Schrödinger independente do tempo dentro do poço, $V(x) = 0$, fornece, respectivamente, os autoestados e autovalores de energia:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{A}} \sin\left(\frac{n\pi x}{A}\right) \quad \text{e} \quad E_n = \frac{(n\pi\hbar)^2}{2mA^2}; \quad n = \{1, 2, 3, \dots\} \quad (1)$$

A solução geral da equação de Schrödinger, sem aplicar o princípio da superposição, é:

$$\Psi_n(x, t) = \psi_n(x)\phi_n(t) = \sqrt{\frac{2}{A}} \sin\left(\frac{n\pi x}{A}\right) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}. \quad (2)$$

Inserindo dinâmica ao sistema, fazendo a segunda barreira mover-se para à direita, a largura do poço variará de acordo com a velocidade constante \vec{u} :

$$A(t) = A(0) + ut. \quad (3)$$

Neste cenário, sem pensar, em princípio, nas consequências teóricas da proposta, podemos levantar a seguinte hipótese: seria

$$\Psi_n(x, A(t)) = \sqrt{\frac{2}{A(t)}} \sin\left[\frac{n\pi x}{A(t)}\right] e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(A(t')) dt'} \quad (4)$$

a solução geral da equação de Schrödinger dentro do poço? Em outras palavras, teria o sistema dinâmico os mesmos autoestados de energia, calculados agora sobre os valores instantâneos de $A(t)$? Sendo o segundo termo, o termo de fase, dado pela função $\phi_n(A(t))$ dependente do valor instantâneo de $A(t)$, tal que $\phi_n(A(t))$ é a solução da equação de Schrödinger dependente do tempo:

$$i\hbar\partial_t\phi_n(A(t)) = E_n(A(t))\phi_n(A(t)) \quad (5)$$

De fato, a eq. (4) não é a solução da equação de Schrödinger. A fase de $\phi_n(A(t)) = e^{i\theta_n(t)}$,

$$\theta_n(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(A(t')) dt', \quad (6)$$

calculada a partir da eq. (1), usando $dt = \frac{dA}{u}$, pode ser escrita em função de $E_n(0) = \frac{(n\pi\hbar)^2}{2mA(0)^2}$:

$$\theta_n(t) = -\frac{E_n(0)}{\hbar} \frac{A(0)t}{A}.$$

Substituindo esta expressão no segundo termo de $\Psi_n(x, A(t))$, ao verificarmos a equação de Schrödinger dentro do poço, $V(x) = 0$, ela não confere:

$$i\hbar\partial_t\Psi_n(x, A(t)) \neq -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\Psi_n(x, A(t)).$$

Todavia, o *ansatz* proposto não é de todo ruim. A solução da equação de Schrödinger confere quando inserimos uma segunda fase $\varphi(t)$,

$$\varphi(t) = \frac{mx^2u}{2\hbar A};$$

tal que a solução geral do problema é, de fato:

$$\Psi_n(x, A(t)) = \psi_n(x, A(t))e^{i(\varphi(t)+\theta_n(t))}, \quad (7)$$

onde $\psi_n(x, A(t)) = \sqrt{\frac{2}{A}} \sin[\frac{n\pi x}{A}]$; ou ainda, aplicando o princípio da superposição,

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x, A(t))e^{i(\varphi(t)+\theta_n(t))}. \quad (8)$$

No instante inicial, $\theta_n(0) = 0$. Chamando $A(0) = a$ e admitindo que, em $t = 0$, $\Psi(x, 0) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin[\frac{\pi x}{a}]$, os coeficientes c_n da série de Fourier gerada por este estado inicial serão:

$$c_n = \frac{2}{a} \int_0^a dx e^{\frac{-imx^2u}{2\hbar a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right). \quad (9)$$

A partir das eq.'s (8) e (9), podemos analisar em que circunstâncias o teorema adiabático é válido. A condição que valida o teorema ocorre quando

$$\frac{mx^2u}{2\hbar a} \longrightarrow 0, \quad (10)$$

neste caso, a exponencial $e^{\frac{-imx^2u}{2\hbar a}} \rightarrow 1$, e os coeficientes c_n recaem na delta:

$$c_n \longrightarrow \delta_{n1}. \quad (11)$$

Substituindo as eq.'s (10) e (11) na eq. (8), assumindo, por exemplo, que o sistema se encontra com a barreira na posição $A(t_f) = 2a$ no instante t_f , a solução geral, nesta aproximação, será:

$$\Psi(x, t_f) = \psi_n(x, 2a)e^{i\theta_n(t_f)} = \sqrt{\frac{2}{2a}} \sin\left(\frac{\pi x}{2a}\right)e^{i\theta_n(t_f)}, \quad (12)$$

ou seja, o estado nesta aproximação continua o mesmo, conforme $\Psi(x, 0)$, calculado agora sobre o novo parâmetro $A(t_f) = 2a$, para o hamiltoniano instantâneo no novo estado. Portanto, a condição definida pela eq. (10) é a aproximação adiabática que procurávamos. Resta-nos interpretar fisicamente

o fenômeno caracterizado por esta aproximação, que possui a informação que define um processo adiabático na física quântica.

Antes de justificarmos a condição impondo $u \rightarrow 0$ em comparação aos parâmetros envolvidos, – explicação que, pura e simplesmente, não nos satisfaz –, buscaremos um conceito mais geral por detrás da física do problema. Neste sentido, podemos relacionar o tempo t_f de deslocamento da barreira com o tempo interno do sistema t_{int} , associado à frequência de oscilação da partícula. O tempo $t_f = \frac{\Delta A}{u}$, para um deslocamento da barreira de a para $2a$, é:

$$t_f = \frac{a}{u}. \quad (13)$$

Enquanto isso, se pensarmos no tempo para $\Psi(x, t)$ completar um ciclo, isto é, evoluir no tempo e voltar ao que era, dado pelo período de oscilação $t_{int} = \frac{2\pi}{\omega}$, sendo ω a frequência $\frac{E_1}{\hbar}$ para um nível de energia padrão $E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$, então temos:

$$t_{int} = \frac{2\pi \hbar}{E_1} \sim \frac{ma^2}{\hbar}. \quad (14)$$

Desta forma, dentro do poço, onde $x^2 \sim a^2$, a aproximação adiabática definida pela eq. (10) conduz à condição:

$$\frac{t_{int}}{t_f} \rightarrow 0, \quad (15)$$

que é, de fato, o conceito geral que explica o fenômeno oculto nos processos adiabáticos na mecânica quântica. Esta condição implica $t_f \gg t_{int}$, ou seja, o processo adiabático no nível quântico caracteriza-se quando o tempo de variação associada à configuração externa do sistema, descrita pelo hamiltoniano, é muito maior que o tempo de variação interna de oscilação das partículas, de modo que a velocidade u , neste exemplo, deve ser tão pequena de tal forma que não invalide a relação $t_f \gg t_{int}$.

A aproximação adiabática expressa pela eq. (15) pode ser entendida em razão das variações de energia. Imaginemos que a barreira de potencial sai de $A(0) = a$ e retorna ao mesmo ponto com uma velocidade média u , levando um tempo $\delta t = 2t_f$. A frequência ω_f de oscilação da barreira será muito menor que a frequência interna das partículas. A variação da energia δH promovida ao sistema pela evolução do hamiltoniano deve ser, portanto, muito menor que a variação δE entre os níveis de energia acessíveis à partícula, $\delta E \equiv \omega \gg \omega_f \equiv \delta H$, em outras palavras,

$$\frac{\delta H}{\delta E} \rightarrow 0; \quad (16)$$

(até aqui, a conexão entre as duas condições não é rigorosamente formal, mas a expressão de δH aparecerá em breve, e esta interpretação será necessária.)

A aproximação adiabática definida acima garante a validade do teorema adiabático. Este comportamento não é particular deste exemplo, mas geral. Cabe-nos tratar o problema de forma geral. Tomando a solução da equação de Schrödinger dada pelo estado

$$|\Psi(\mathbf{x}, t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\psi_n(t)\rangle e^{i\theta_n(t)}, \quad (17)$$

sendo $|\psi_n(t)\rangle = |\psi_n(\mathbf{x}, t)\rangle$ os autoestados de energia do hamiltoniano instantâneo:

$$H(t) |\psi_n(t)\rangle = E_n(t) |\psi_n(t)\rangle, \quad (18)$$

e as fases $\theta_n(t)$ definidas pela eq. (6), a equação de Schrödinger

$$i\hbar \partial_t |\Psi(\mathbf{x}, t)\rangle = H(t) |\Psi(\mathbf{x}, t)\rangle \quad (19)$$

fornece, após aplicarmos $\langle \psi_m(t) |$ dos dois lados,

$$\dot{c}_m(t) = - \sum_n c_n(t) \langle \psi_m(t) | \dot{\psi}_n(t) \rangle e^{i(\theta_n - \theta_m)}. \quad (20)$$

Derivando a eq. (18) e multiplicando-a, da mesma forma, pelo $\langle \psi_m(t) |$, encontramos:

$$\langle \psi_m(t) | \dot{H} | \psi_n(t) \rangle = (E_n - E_m) \langle \psi_m(t) | \dot{\psi}_n(t) \rangle + \dot{E}_n(t) \delta_{nm},$$

ou seja, para $n \neq m$,

$$\langle \psi_m(t) | \dot{\psi}_n(t) \rangle = \frac{\langle \psi_m(t) | \dot{H} | \psi_n(t) \rangle}{E_n - E_m}; \quad (21)$$

tal que, extraíndo do somatório da eq. (20) o termo $n = m$ e substituindo a eq. (21) nos termos $n \neq m$, chegamos a:

$$\dot{c}_m(t) = -c_m(t) \langle \psi_m(t) | \dot{\psi}_m(t) \rangle - \sum_{n \neq m} c_n(t) \frac{\langle \psi_m(t) | \dot{H} | \psi_n(t) \rangle}{E_n - E_m} e^{i(\theta_n - \theta_m)}. \quad (22)$$

Aplicando a aproximação adiabática, o segundo termo é desprezível. Como havíamos interpretado, em um processo adiabático, a variação promovida pelo hamiltoniano é muito menor que a variação entre as energias acessíveis. Tomando a taxa de variação \dot{H} como sendo a responsável pela variação δH do

estado, citada anteriormente, tal que $c_n(t)\langle\psi_m(t)|\dot{H}|\psi_n(t)\rangle \equiv \delta H_{mn}$, e a variação interna das energias $\delta E_{mn} = E_n - E_m$, então a aproximação adiabática é expressa formalmente pela condição:

$$\frac{c_n(t)\langle\psi_m(t)|\dot{H}|\psi_n(t)\rangle}{E_n - E_m} \longrightarrow 0, \quad n \neq m. \quad (23)$$

Assim, os coeficientes na aproximação adiabática reduzem-se apenas ao primeiro termo da eq. (22):

$$\dot{c}_m(t) = -c_m(t)\langle\psi_m(t)|\dot{\psi}_m(t)\rangle, \quad (24)$$

daí,

$$c_m(t) = c_m(0)e^{i\gamma_m(t)}, \quad (25)$$

onde definimos a fase γ_m por:

$$\gamma_m(t) = i \int_0^t \langle\psi_m(t')|\partial_{t'}|\psi_m(t')\rangle dt'. \quad (26)$$

Substituindo os coeficientes em $|\Psi(\mathbf{x}, t)\rangle$ dado pela eq. (17), a solução geral da equação de Schrödinger é:

$$|\Psi(\mathbf{x}, t)\rangle = \sum_n c_n(0)|\psi_n(t)\rangle e^{i\gamma_n} e^{i\theta_n}. \quad (27)$$

Se a partícula estiver inicialmente no estado estacionário $|\psi_m(t)\rangle$, então $c_m(0) = 1$ e $c_{n \neq m} = 0$, já que $\gamma_n(0) = \theta_n(0) = 0$. Neste caso,

$$|\Psi(\mathbf{x}, t)\rangle = c_m(0)|\psi_m(t)\rangle e^{i\gamma_m} e^{i\theta_m}. \quad (28)$$

Esta é, portanto, a solução que elucidada o teorema adiabático para uma evolução geral de um estado estacionário regida pela aproximação adiabática definida pela eq. (23). No fim, o sistema continua em um estado que é autoestado do hamiltoniano instantâneo $H(t)$. Para que tudo se encaixe, o estado deve evoluir por uma fase. Neste ponto, a analogia com a física clássica é inviável. Não existe um paralelo entre o conceito de processo adiabático na termodinâmica e o acúmulo de fases complexas, cujo efeito pode ser sentido em fenômenos de interferência.

A fase acumulada, por sua vez, pode ser dividida em duas: $\theta_n(t)$ e $\gamma_n(t)$. A primeira, oriunda da primeira tentativa de inserir dinâmica ao sistema, tomando a estrutura da equação de Schrödinger dependente do tempo no sistema não-dinâmico, é denominada *fase dinâmica*. A segunda é a conhecida *fase geométrica*, que denotaremos por γ_g , que pode ser determinada unicamente em função da geometria descrita pelo evolução do estado no espaço dos parâmetros que variam. A definição de espaço dos parâmetros e a análise geométrica de γ_g serão desenvolvidas ao longo do texto.

2.2 A reparametrização da fase de Berry e a invariância de gauge

Admitamos que o hamiltoniano de um sistema não-dinâmico depende dos parâmetros $\mathbf{R} = (R_x, R_y, \dots, R_d)$, $H = H(\mathbf{R})$. Atribuindo dinâmica ao sistema, variando adiabaticamente os parâmetros, tal que $\mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}(t)$, se a parametrização $\mathbf{R}(t) \times t$ for um para um, então $\mathbf{R}(t)$ percorrerá uma trajetória contínua no espaço dos parâmetros d -dimensional, sendo o espaço dos parâmetros definido pelo eixo de coordenadas $(\hat{R}_x, \hat{R}_y, \dots, \hat{R}_d)$.

A partir desta parametrização, temos $|\psi_n(t)\rangle \rightarrow |\psi_n(\mathbf{R}(t))\rangle$, e a fase geométrica poderá ser reparametrizada no espaço dos parâmetros, de modo que, se a evolução for cíclica no intervalo $[0, \tau]$, isto é, $\mathbf{R}(0) = \mathbf{R}(\tau)$, a fase geométrica será representada como uma integral de linha fechada, sobre um caminho C , donde, chamando $A_i = \langle \psi_n | \partial_{R_i} | \psi_n \rangle$, ou seja, $\vec{A} = (A_1, A_2, \dots, A_d) = \langle \psi_n | \vec{\nabla}_R | \psi_n \rangle$,

$$\gamma_g(\tau) = i \oint_C \vec{A} \cdot d\vec{R}. \quad (29)$$

Quando a evolução é cíclica no intervalo $[0, \tau]$, em um processo adiabático, denominamos a fase geométrica acumulada em um ciclo de fase de Berry.

Em um sistema que depende de três parâmetros, $\mathbf{R} = (R_x, R_y, R_z)$, o espaço dos parâmetros é tridimensional. Aplicando o teorema de Stokes,

$$\gamma_g(\tau) = i \oint_S \vec{\nabla} \times \vec{A} \cdot d\vec{S}, \quad (30)$$

sendo S uma superfície orientada neste espaço, de acordo com a orientação da borda C . Por esta expressão, notamos que, se os parâmetros que evoluem no espaço não circunscreverem uma região com extensão, a fase geométrica será nula. Por exemplo, no caso em que

$R_z = 0$, o teorema de Stokes reduz-se ao teorema de Green no plano $R_x \times R_y$. Se a evolução cíclica for descrita por uma ida e volta ao longo de uma linha, como no exemplo $A \rightarrow B \rightarrow A$ da figura ao lado, então $\gamma_g = 0$. Podemos deformar o caminho continuamente ao longo da linha, que a fase será sempre nula, de modo que a fase geométrica será invariante sob a retração $(I) \rightarrow (II)$ ilustrada pela Fig. 2, na qual o caminho é deformado continuamente a um ponto.

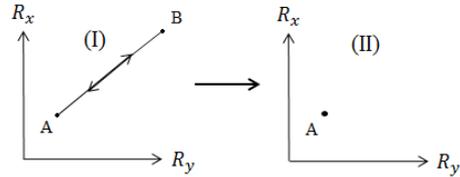


Figura 2: retração

Em um caso geral descrito pela eq. (30), se o estado $|\psi_n\rangle$ sofrer uma transformação por uma fase que depende dos parâmetros,

$$|\psi_n\rangle' \rightarrow e^{-i\Lambda(\mathbf{R})}|\psi_n\rangle, \quad (31)$$

a fase geométrica se manterá invariante. Substituindo a transformação em $\vec{A} = \langle\psi_n|\nabla_R|\psi_n\rangle$, encontramos:

$$\vec{A}' \rightarrow \vec{A} + \vec{\nabla}_R\Lambda. \quad (32)$$

Portanto, a transformação faz com que \vec{A} difira por um gradiente $\vec{\nabla}_R\Lambda$, que é imediatamente anulado pela aplicação do rotacional. A invariância de \vec{A} pelo acréscimo de um gradiente está em consonância com a solução apresentada por Berry para o efeito Aharonov-Bohm. No seu artigo, Berry resolve o problema associando $\langle\psi_n|\nabla_R|\psi_n\rangle$ com as três componentes do potencial vetor $\vec{A}(\mathbf{R})$ pela relação $\langle\psi_n|\nabla_R|\psi_n\rangle = -i\frac{q}{\hbar}\vec{A}(\mathbf{R})$, sendo \mathbf{R} o vetor posição do centro de uma caixa que contém a partícula, circulando ao redor do solenóide. Substituindo esta relação na eq. (30), donde $\vec{B} = \vec{\nabla}_R \times \vec{A}(\mathbf{R})$ é o campo magnético e Φ_B , o fluxo, ele encontrou $\gamma_g = \frac{q}{\hbar}\Phi_B$, o mesmo resultado predito por Aharonov e Bohm, verificado experimentalmente por R. G. Chambers [24].

Assim, Berry mostrou que o efeito Aharonov-Bohm pode ser entendido como o acúmulo de uma fase geométrica em uma evolução cíclica. A invariância por transformação da eq. (31) é a invariância de gauge na mecânica quântica. Ela não é particular do eletromagnetismo, mas válida para qualquer processo adiabático que pode ser escrito como uma integral de linha no espaço dos parâmetros, em que não haja problemas para se aplicar o teorema de Stokes. Demonstraremos, mais a frente, que a invariância de gauge também é válida para processos não adiabáticos, usando o formalismo de Mukunda-Simon.

3 Do caso particular de uma partícula de spin 1/2 para uma evolução U(2) geral

3.1 Uma partícula de spin $\frac{1}{2}$ sob a ação de um campo magnético que evolui adiabaticamente

Quando consideramos o caso de uma partícula de spin $\frac{1}{2}$ sob a ação de um campo magnético que efetua uma evolução cíclica por um processo adiabático, a fase geométrica adquirida pelo estado da partícula pode ser interpretada

como um ângulo sólido no espaço dos parâmetros que variam. Neste caso particular, os parâmetros são as componentes do campo.

O fenômeno pode ser compreendido seguindo a seguinte interpretação: ao entrar em uma região na presença de um campo magnético, o spin da partícula tende a alinhar-se com o sentido do vetor do campo, por ser esta a configuração que minimiza a energia potencial. Em um processo adiabático, podemos fazer uma aproximação admitindo que o spin, a cada instante da evolução, é imediatamente alinhado, de modo que o eixo do spin acompanha a variação determinada pelas linhas de campo. (Foi esta interpretação usada por T. Bitter e D. Dubers para o cálculo da fase geométrica no experimento (descrita por Berry em [7]) com spins de neutrons interagindo com um campo magnético helicoidal.) A Fig. 3 ilustra a interação do spin com o campo em uma evolução cíclica. Ao sair da região, apesar da orientação do spin ser a mesma, o estado da partícula acumula uma fase.

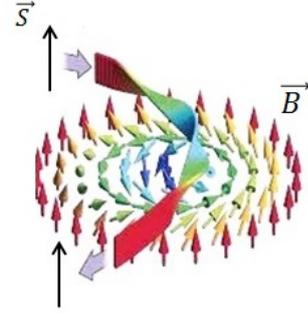


Figura 3: interação

A melhor forma de tratar o problema e interpretá-lo geometricamente é resolvê-lo no referencial de repouso da partícula, com a partícula na origem do eixo de coordenadas, dadas pelas componentes do campo, isto é, no espaço dos parâmetros que variam. Um dos exemplos mais simples que facilitam a visualização é a evolução do campo magnético sobre uma superfície cônica (ver Fig. 4). Nesta evolução, o módulo do campo, B_0 , não varia e ele pode ser parametrizado por

$$\vec{B}(t) = B_0\{\sin \alpha \cos \phi(t)\hat{x} + \sin \alpha \sin \phi(t)\hat{y} + \cos \alpha \hat{z}\}, \quad (33)$$

onde α é o ângulo azimutal, constante para o cone, e ϕ , o ângulo polar. (Se \vec{B} , por exemplo, girar com velocidade angular constante ω , então $\phi = \omega t$.)

O hamiltoniano deste sistema, desprezando a interação com spins vizinhos e efeitos devido a interação entre o momento de dipolo magnético orbital e o campo, é

$$\hat{H} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}, \quad (34)$$

sendo $\vec{\mu}$ o momento de dipolo magnético da partícula, que se relaciona com o spin pela relação $\vec{\mu} = \gamma \vec{S}$, onde γ é a razão giromagnética e \vec{S} o vetor do spin $\frac{1}{2}$ em uma direção arbitrária, $\vec{S} = S_x \hat{x} + S_y \hat{y} + S_z \hat{z}$, tal que, em termos das

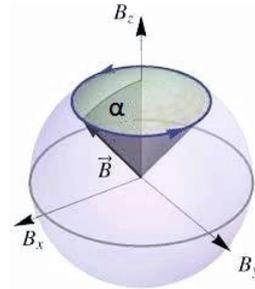


Figura 4: rotação

matrizes de Pauli:

$$\hat{H}(t) = -\frac{\gamma B_0}{2} \{ \sin \alpha \cos \phi(t) \sigma_x + \sin \alpha \sin \phi(t) \sigma_y + \cos \alpha \sigma_z \},$$

e, portanto,

$$\hat{H}(t) = \frac{\hbar \omega_1}{2} \begin{pmatrix} \cos \alpha & e^{-i\phi(t)} \sin \alpha \\ e^{i\phi(t)} \sin \alpha & -\cos \alpha \end{pmatrix}, \quad \omega_1 = -\gamma B_0. \quad (35)$$

O teorema adiabático garante que o sistema será descrito pela equação de Schrödinger com os autovalores de energia calculados agora sobre o valor instantâneo do parâmetro que varia, $\hat{H}(\phi(t))|\chi(\phi(t))\rangle = E(\phi(t))|\chi(\phi(t))\rangle$. Esta equação, com o hamiltoniano acima, fornece os autovetores:

$$|\chi_+(t)\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\alpha}{2} \\ e^{i\phi(t)} \sin \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix}, \quad |\chi_-(t)\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\phi(t)} \sin \frac{\alpha}{2} \\ -\cos \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix}; \quad (36)$$

com os respectivos autovalores $E_{\pm} = \pm \frac{1}{2} \hbar \omega_1$.

A fase de Berry para o estado $|\chi_+\rangle$ sobre o único parâmetro que varia, $\phi(t)$, é calculada pela expressão

$$\gamma_g = i \oint \langle \chi_+ | \partial_\phi | \chi_+ \rangle d\phi. \quad (37)$$

Substituindo $|\chi_+\rangle$ exposto acima,

$$\gamma_g = - \oint \sin^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) d\phi;$$

como α é constante sobre o cone, o seno sai da integral e $\gamma_g = -2\pi \sin^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) = \pi(\cos \alpha - 1)$. Por sua vez, o ângulo sólido subentendido pelo cone, (indicado pela região verde no topo da Fig. 4), é

$$\Omega = \int_0^{2\pi} \int_0^\alpha \sin \theta d\theta d\phi = -2\pi(\cos \alpha - 1),$$

portanto,

$$\gamma_g = -\frac{1}{2}\Omega. \quad (38)$$

Este importante resultado indica que a fase de Berry pode ser interpretada unicamente em função da geometria relacionada à evolução cíclica dos parâmetros, definida pelo caminho gerado pelo vetor que representa esta variação. Calculando a fase para o mesmo problema, mas agora considerando

que, além de ϕ , α também varia com o tempo – variar B_0 não altera a fase, pois a dependência de $B_0(t)$ desaparece no cálculo dos autoestados – de modo que a evolução de \vec{B} não mais se restringe a um cone, chamando

$$|\chi_+(t)\rangle = |\chi_+(\phi(t), \alpha(t))\rangle,$$

a fase de Berry reparametrizada em função destes dois parâmetros será uma integral de linha:

$$\gamma_g = i \oint \langle \chi_+ | \vec{\nabla}_R | \chi_+ \rangle \cdot d\vec{R}; \quad (39)$$

donde $\vec{\nabla}_R | \chi_+ \rangle$ pode ser calculado em coordenadas esféricas (r, α, ϕ) :

$$\vec{\nabla}_R | \chi_+ \rangle = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} \sin \frac{\alpha}{2} \\ \frac{1}{2} e^{i\phi} \cos \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix} \hat{\alpha} + \frac{1}{r \sin \alpha} \begin{pmatrix} 0 \\ i e^{i\phi} \sin \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix} \hat{\phi};$$

e, conseqüentemente,

$$\langle \chi_+ | \vec{\nabla}_R | \chi_+ \rangle = \frac{i \sin^2(\frac{\alpha}{2})}{r \sin \alpha} \hat{\phi}.$$

Usando o teorema de Stokes no espaço dos parâmetros para $\vec{A} = \langle \chi_+ | \vec{\nabla}_R | \chi_+ \rangle$, teremos $\gamma_g = i \oint \vec{A} \cdot d\vec{R} = i \int_S (\vec{\nabla} \times \vec{A}) \cdot d\vec{S}$, tal que, em coordenadas esféricas, (lembrando que α é o ângulo azimutal):

$$\vec{\nabla} \times \vec{A} = \frac{1}{r \sin \alpha} \partial_\alpha \left(\sin \alpha \frac{i \sin^2(\frac{\alpha}{2})}{r \sin \alpha} \right) \hat{r} = \frac{i}{2r^2} \hat{r}$$

e, finalmente,

$$\gamma_g = -\frac{1}{2} \int_S \frac{\hat{r}}{r^2} \cdot d\vec{S}, \quad (40)$$

que é exatamente o ângulo sólido gerado por uma superfície arbitrária S subentendida por um ponto P , projetada sobre a esfera de raio \vec{r} centralizada em P :

$$\gamma_g = -\frac{1}{2} \Omega.$$

Encontramos exatamente a mesma expressão em dois casos distintos e idenpendentes entre si, o que aponta para um comportamento geral da fase geométrica. Até aqui, porém, nos limitamos apenas a um caso particular: uma partícula de spin $\frac{1}{2}$ sob a ação de um campo magnético, o que não nos garante que resultados análogos podem ser encontrados em todo sistema físico de dois níveis sob uma evolução temporal cíclica qualquer.

3.2 A generalização da fase geométrica para um qubit via formalismo de Mukunda-Simon

Assumindo que a fase total adquirida em um processo geral não necessariamente adiabático é dada pela soma de uma fase geométrica com uma fase dinâmica, a fase geométrica pode ser escrita na forma proposta por Mukunda e Simon [5, 6]:

$$\gamma_g(t) = \text{Arg}\langle\Psi(0)|\Psi(t)\rangle + i \int_0^t \langle\Psi(t')|\partial_{t'}|\Psi(t')\rangle dt'. \quad (41)$$

O formalismo de Mukunda-Simon generaliza a fase geométrica para qualquer processo físico. Ela é, portanto, a extensão da teoria que antes admitia o acúmulo de uma fase geométrica apenas em processos adiabáticos. Se imaginarmos uma evolução sucessiva realizada por transições entre N estados, partindo de $|\Psi_1\rangle$ e retornando ao mesmo:

$$|\Psi_1\rangle \rightarrow |\Psi_2\rangle \rightarrow \cdots \rightarrow |\Psi_{N-1}\rangle \rightarrow |\Psi_N\rangle \rightarrow |\Psi_1\rangle, \quad (42)$$

o caminho descrito pelas amplitudes de transição, para $N > 2$, será dado por um número complexo:

$$\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle\langle\Psi_2|\Psi_3\rangle\langle\Psi_3|\Psi_4\rangle\cdots\langle\Psi_{N-1}|\Psi_N\rangle\langle\Psi_N|\Psi_1\rangle = r e^{-i\phi}; \quad (43)$$

onde r e ϕ são reais.

É fácil perceber que qualquer caminho é invariante por transformações $|\Psi_i\rangle \rightarrow e^{i\theta}|\Psi_i\rangle$, visto que cada termo exponencial é eliminado pelo seu conjugado complexo. Desta forma, usando a propriedade $\text{Arg}\{z_1 z_2 \cdots z_N\} = \sum_{i=1}^N \text{Arg} z_i$, a eq. (43) fornece:

$$-\phi = \sum_{i=1}^N \text{Arg}\langle\Psi_i|\Psi_{i+1}\rangle - \text{Arg}\langle\Psi_1|\Psi_N\rangle, \quad (44)$$

(usamos $\text{Arg} z = -\text{Arg} z^*$ no último termo). Para chegarmos à expressão de Mukunda-Simon, basta estendermos a equação acima para um contínuo de infinitos estados e infinitas transições, fazendo a seguinte identificação para as evoluções infinitesimais sucessivas:

$$|\Psi_i\rangle \equiv |\Psi(t_i)\rangle; \quad |\Psi_{i+1}\rangle \equiv |\Psi(t + dt)\rangle; \quad (45)$$

tal que, expandindo em série de Taylor $|\Psi(t + dt)\rangle = |\Psi(t)\rangle + |\dot{\Psi}(t)\rangle dt$, obtemos:

$$\langle\Psi_i|\Psi_{i+1}\rangle \equiv \langle\Psi(t)|\Psi(t + dt)\rangle = 1 + \langle\Psi(t)|\partial_t|\Psi(t)\rangle dt. \quad (46)$$

Sabemos que $\langle \Psi(t) | \partial_t | \Psi(t) \rangle$ é um imaginário puro, isto é,

$$\text{Im}\{\langle \Psi(t) | \partial_t | \Psi(t) \rangle\} = -i \langle \Psi(t) | \partial_t | \Psi(t) \rangle dt;$$

usando este resultado e o fato desta altura no eixo dos imaginários ser muito pequena, o argumento dos termos do somatório em transições infinitesimais será (usando $\tan \varepsilon \simeq \varepsilon$):

$$\text{Arg} \langle \Psi(t) | \Psi(t + dt) \rangle \simeq \frac{\text{Im}\{1 + \langle \Psi(t) | \partial_t | \Psi(t) \rangle dt\}}{\text{Re}\{1 + \langle \Psi(t) | \partial_t | \Psi(t) \rangle dt\}} = -i \langle \Psi(t) | \partial_t | \Psi(t) \rangle dt; \quad (47)$$

e então, substituindo a eq. (47) na eq. (44), reconhecendo $|\Psi_i\rangle \equiv |\Psi(0)\rangle$ e $|\Psi_N\rangle = |\Psi(t)\rangle$, e transformando o somatório em uma integral no contínuo das transições no intervalo $[0, t]$, a eq. (41) fica demonstrada quando interpretamos a fase ϕ como a fase geométrica adquirida pelo estado. (Em nenhum momento da exposição, determinamos que a evolução deve ser lenta.)

No caso particular de uma evolução adiabática cíclica, tal que

$$|\Psi(\tau)\rangle = e^{i\phi_{tot}(\tau)} |\Psi(0)\rangle, \quad (48)$$

ela recai naturalmente na expressão anterior. A demonstração é imediata: o primeiro termo é a fase total adquirida pelo estado ao completar o ciclo, e o segundo é a fase dinâmica, que se reduz à forma

$$\phi_{din}(\tau) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^\tau E_n(R(t)) dt,$$

usando a equação de Schrödinger $i\hbar\partial_t|\Psi(t)\rangle = \hat{H}|\Psi(t)\rangle$:

$$\phi_{din}(\tau) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^\tau E_n(R(t')) dt' = -\frac{1}{\hbar} \int_0^\tau \langle R(t'), n | \hat{H}(R(t')) | R(t'), n \rangle dt' =$$

(inserindo uma fase $\alpha(t)$ dos dois lados, tal que $|\Psi(t)\rangle = e^{i\alpha(t)} |R(t), n\rangle$ é a solução da equação de Schrödinger)

$$\begin{aligned} &= -\frac{1}{\hbar} \int_0^\tau \langle R(t'), n | e^{-i\alpha(t')} \hat{H}(R(t')) e^{i\alpha(t')} | R(t'), n \rangle dt' \\ &= -i \int_0^\tau \langle \Psi(t') | \partial_{t'} | \Psi(t') \rangle dt', \end{aligned}$$

e, com isto, a expressão acima representa simplesmente $\gamma_g = \phi_{tot} - \phi_{din}$.

Pelo formalismo de Mukunda-Simon, notamos que a fase geométrica é invariante sob a transformação

$$|\Psi(t)\rangle \rightarrow e^{if(t)} |\Psi(t)\rangle, \quad (49)$$

onde $f(t)$ é uma fase arbitrária que depende do tempo. Para verificar, basta substituir a transformação na equação e usar $Arg(z_1 z_2) = Arg z_1 + Arg z_2$ no primeiro termo, e a normalização de $|\Psi\rangle$ no segundo: – substituindo a transformação no primeiro termo da eq. (41), encontramos

$$Arg\langle\Psi(0)|e^{-if(0)}e^{if(t)}|\Psi(t)\rangle = Arg\langle\Psi(0)|\Psi(t)\rangle + f(t) - f(0); \quad (50)$$

substituindo agora no segundo, temos

$$\begin{aligned} & i \int_0^t \langle\Psi(t')|e^{-if(t')} [e^{if(t')} i \dot{f}(t') |\Psi(t')\rangle + e^{if(t')} \partial_{t'} |\Psi(t')\rangle] dt' \\ &= - \int_0^t \dot{f}(t') dt' + i \int_0^t \langle\Psi(t') \partial_{t'} |\Psi(t')\rangle dt' \\ &= -[f(t) - f(0)] + i \int_0^t \langle\Psi(t') \partial_{t'} |\Psi(t')\rangle dt'. \end{aligned} \quad (51)$$

Somando as duas, o segundo termo da eq. (50) cancela o primeiro da eq. (51), restando γ_g , ou seja, $\gamma'_g = \gamma_g$.

Desta forma, verifica-se que a invariância de gauge da fase geométrica pelo formalismo de Mukunda-Simon não é válida somente para os processos adiabáticos cíclicos, mas para qualquer evolução. A propriedade de invariância por recalibrações confere o caráter geométrico à fase, possibilitando a interpretação associada à trajetória descrita pelos parâmetros do estado no espaço que representa os estados acessíveis ao sistema.

Sendo geral, podemos aplicar esta invariância à evolução arbitrária de um sistema quântico de N níveis. Sabemos que a evolução temporal de um estado, devido a conservação de probabilidade, é realizada por um operador unitário pertencente ao grupo $U(N)$:

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U} |\Psi(0)\rangle. \quad (52)$$

Porém, um elemento do grupo $U(N)$ pode ser escrito em função do $SU(N)$, a menos de uma fase:

$$\hat{U} = e^{if} \hat{S}; \quad (53)$$

(percebemos que a propriedade $\hat{U}^\dagger \hat{U} = 1$ é conservada, já que $\hat{S}^\dagger \hat{S} = 1$; e, além disso, sendo N a dimensão da matriz, $\det \hat{U} = e^{iNf} \det \hat{S}$; mas $\det \hat{S} = 1$, donde $\det \hat{U} = e^{iNf} = e^{ifase}$, de forma que as duas propriedades do grupo $U(N)$ são preservadas.)

Usando, então, a invariância da fase geométrica, o termo de fase e^{if} não contribui. Eliminando-o, a evolução do sistema pode ser descrita por $|\Psi(t)\rangle = \hat{S} |\Psi(0)\rangle$, sendo:

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ -\bar{\beta} & \bar{\alpha} \end{pmatrix}, \quad \text{com } |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1; \quad (54)$$

que garantem, de uma só vez, $\det \hat{S} = 1$ e $\hat{S} \hat{S}^\dagger = 1$, *i.e.*, $\hat{S} \in SU(2)$. Sendo χ_1 a fase do número complexo α , reescrevendo $\beta = \gamma e^{-i\chi_1}$, tal que $|\gamma| = |\beta|$ e a fase $\chi_\gamma = \chi_\beta + \chi_1$, temos:

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} |\alpha| e^{i\chi_1} & \gamma e^{-i\chi_1} \\ -\bar{\gamma} e^{i\chi_1} & |\alpha| e^{-i\chi_1} \end{pmatrix},$$

ou ainda,

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} |\alpha| & \gamma \\ -\bar{\gamma} & |\alpha| \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\chi_1} & 0 \\ 0 & e^{-i\chi_1} \end{pmatrix}. \quad (55)$$

A segunda matriz também não contribui para a fase geométrica, já que, aplicada a qualquer $|\Psi(0)\rangle$, ela apenas acrescenta um termo de fase. Restamos, portanto, apenas a primeira matriz. Como o determinante da segunda é unitário, o determinante da primeira também deve ser para que $\det \hat{S} = 1$; e, usando a condição $\hat{S} \hat{S}^\dagger = 1$, a primeira matriz também deve ser unitária. Estas duas condições são satisfeitas pela parametrização (a segunda matriz já foi eliminada):

$$\hat{S}_{quo} = SU(2)/U(1) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & \sin(\frac{\theta}{2}) e^{i\phi} \\ -\sin(\frac{\theta}{2}) e^{-i\phi} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}; \quad (56)$$

onde $\frac{\theta}{2} \in [0, \frac{\pi}{2})$, em virtude do cosseno e do seno parametrizarem módulos, que são sempre positivos.

Considerando um sistema de dois níveis que pode assumir os estados $\{|1\rangle, |2\rangle\}$, se o estado inicial for, por exemplo, $|1\rangle$, na sua própria base:

$$|\Psi(0)\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad (57)$$

e aplicando agora a matriz \hat{S} parametrizada após as eliminações:

$$|\Psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ -\sin(\frac{\theta}{2}) e^{-i\phi} \end{pmatrix}, \quad (58)$$

de modo que a fase geométrica, para um evolução cíclica sobre uma curva fechada C, considerando que os dois parâmetros, θ e ϕ , variam com o tempo, será:

$$\gamma_g = i \oint_C \langle \Psi | \partial_\theta | \Psi \rangle d\theta + \langle \Psi | \partial_\phi | \Psi \rangle d\phi = i \oint_C 0 d\theta - i \sin^2(\frac{\theta}{2}) d\phi;$$

usando o teorema de Green, $\oint_C A_\theta d\theta + A_\phi d\phi = \int_S (\partial_\phi A_\theta - \partial_\theta A_\phi) d\theta d\phi$, para $A_\theta = 0$ e $A_\phi = -i \sin^2 \frac{\theta}{2}$, encontramos

$$\gamma_g = -\frac{1}{2} \int_S \sin \theta d\theta d\phi = -\frac{1}{2} \Omega. \quad (59)$$

Enfim, chegamos novamente a mesma expressão para uma evolução cíclica de um qubit, donde podemos concluir que a interpretação da fase geométrica como um ângulo sólido pode ser generalizada para qualquer sistema de dois níveis. Antes, no caso da interação da partícula com o campo magnético, o espaço dos parâmetros referia-se às componentes do campo. Neste caso, $\theta(t)$ e $\phi(t)$ são, respectivamente, os ângulos azimutal e polar que parametrizam uma evolução arbitrária de um qubit, que descrevem uma curva fechada C que encerra uma superfície S no espaço que representa os estados, definido, *a posteriori*, como o espaço que comporta tais ângulos. (O espaço que representa todos os estados acessíveis do sistema será dito *espaço de estados*.)

3.3 Relação de equivalência, teorema da partição e subgrupo de estabilidade

O conceito de relação de equivalência exerce um papel central na teoria envolvendo a fase geométrica. A partir dela, os pontos no espaço de estados representarão estados físicos distintos, de modo que a evolução temporal do estado desenhará uma trajetória contínua no espaço, que permitirá a interpretação geométrica de forma análoga à interpretação no espaço dos parâmetros, no caso da interação da partícula com o campo magnético. Se um estado fosse representado por dois ou mais pontos no espaço de estado, não seria possível representar a evolução como uma única trajetória.

Indica-se a relação de equivalência pelo símbolo \sim . Esta relação é caracterizada por três propriedades: as propriedades I) reflexiva, II) simétrica e III) transitiva, definidas pelas relações:

- I) $x R x$;
- II) se $x R y$, então $y R x$;
- III) se $x R y$ e $y R z$, então $x R z$;

com isso, dizemos que R é uma relação de equivalência, $R \rightarrow \sim$.

Apenas como base de comparação, a relação de ordem $R \rightarrow \geq$ obedece a propriedade reflexiva: $x \geq x$. Obedece, também, a transitiva: se $x \geq y$ e $y \geq z$, então $x \geq z$. Porém não obedece a simétrica, pois, neste caso, se $x \geq y$ e $y \geq x$, então $x = y$, que é uma relação antissimétrica.

Um dos exemplos clássicos da relação de equivalência na física é a invariância no cálculo da amplitude de probabilidade pelo acréscimo de uma fase global:

$$|\Psi\rangle' R e^{if} |\Psi\rangle. \quad (60)$$

Ora, para a relação $|\Psi\rangle R |\Psi\rangle'$, a propriedade reflexiva confere quando $f = 0$. Se $|\Psi\rangle'$ relaciona-se com $|\Psi\rangle$ via e^{if} , então $|\Psi\rangle$ relaciona-se com $|\Psi\rangle'$ via

e^{-if} , ou seja, vale a simétrica. Por fim, se $|\Psi\rangle$ relaciona-se com $|\Psi'\rangle$ via e^{if_1} e $|\Psi'\rangle$ relaciona-se com $|\Psi''\rangle$ via e^{if_2} , então $|\Psi\rangle$ relaciona-se com $|\Psi''\rangle$ via $e^{i(f_1+f_2)}$, conferindo a transitiva. De fato, a eq. (60) representa uma relação de equivalência, $|\Psi\rangle \sim |\Psi'\rangle$.

A relação de equivalência permite que elementos que não contribuem para a física, gerados por certas transformações, sejam *descartados*, sem provocar inconsistência na representação destes estados como uma única classe de estados. Se quiséssemos agrupar todo $|\Psi'\rangle$ em uma única classe de estados representada por $|\Psi\rangle$, e $|\Psi\rangle$ se relacionasse com $|\Psi'\rangle$, mas $|\Psi\rangle$ não se relacionasse com $|\Psi''\rangle$, isto não poderia ser feito. Se o estado se encontrasse, em dado instante, em $|\Psi'\rangle$, ele não poderia ser levado a $|\Psi\rangle$. A teoria não faria sentido.

O raciocínio sobre a propriedade transitiva é o mesmo: se após uma evolução sucessiva, o estado inicial não se relacionasse mais com o terceiro estado, supostamente da mesma classe, após uma evolução temporal por transformações que geravam elementos, em tese, *descartáveis*, a representação por uma única classe falharia. A necessidade da relação reflexiva, com estes argumentos, é evidente. Chamamos o conjunto que contém elementos $\{x^1, x^2, \dots, x^n\}$ que se relacionam por um relação de equivalência de classe de equivalência, denotada por $[x]$,

$$x \in \text{conjunto } X; [x] \subseteq X, \text{ tal que } [x] = \{x^i / x^i \in X \text{ e } x \sim x^i\}. \quad (61)$$

A demonstração formal de que a relação de equivalência confere aos elementos da classe de equivalência uma única representação, sem que haja, dentro da classe, elementos advindo de outras classes de equivalência, é dada pelo teorema da partição. O teorema da partição garante que não existe um elemento que pertence, ao mesmo tempo, a duas classes de equivalência, isto é, que não existe intersecção entre duas classes de equivalência, de modo que dois elementos que se relacionam por uma relação de equivalência continuam sempre na mesma classe. Na figura ao lado, os círculos representam conjuntos. Na figura **A**, os conjuntos ainda não foram particionados, contendo elementos nas interseções. Ao particionarmos o espaço na figura **B** em classes de equivalência, as interseções desaparecem.

A prova do teorema segue o seguinte caminho: admitamos que as classes de equivalência $[x]$ e $[y]$ possuem um elemento em comum z , ou seja, para um elemento $x \in [x]$ e outro $y \in [y]$,

$$x \sim z \quad \text{e} \quad y \sim z;$$

usando a propriedade simétrica: se $y \sim z$ então $z \sim y$;

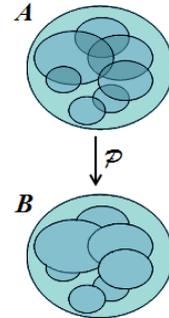


Figura 5: A-B

e então, usando agora a propriedade transitiva:

$$\text{se } x \sim z \text{ e } z \sim y, \text{ então } x \sim y. \quad (62)$$

Para qualquer $x' \in [x]$, as três propriedades garantem: $x \sim x'$, e então, valendo a simétrica, $x' \sim x$. Ao casarmos esta última relação com a eq. (62) e usarmos novamente a propriedade transitiva: $x' \sim y$. E então, pela simétrica novamente: $y \sim x'$, logo

$$x' \in [y], \forall x' \implies [x] \subseteq [y]. \quad (63)$$

Fazendo o mesmo para qualquer $y' \in [y]$, tal que $y \sim y'$, usando a eq. (62), $x \sim y'$, logo

$$y' \in [x], \forall y' \implies [y] \subseteq [x]. \quad (64)$$

As eq.'s (63) e (64) são verdadeiras se, e somente se,

$$[x] = [y]. \quad (65)$$

Donde se conclui que as classes de equivalência $[x]$ e $[y]$ possuirão um elemento em comum se forem a mesma classe. Em outras palavras, para classes de equivalência distintas, não existe interseção entre elas: $[x] \cap [y] = \emptyset$.

Podemos associar estes conceitos à definição de subgrupo de estabilidade. Primeiramente, um subgrupo H de um grupo G é um subconjunto contido em G que também é um grupo, isto é, para h, h_1 e $h_2 \in G$, o produto $h_1 h_2$ e a inversa $h^{-1} \in H$, além de contar com o elemento neutro. (A propriedade associativa é garantida porque $H \subset G$.) Seja $A = \{a\}$ um espaço homogêneo com respeito ao grupo G , tal que G atua transitivamente em A :

$$\forall a' \in A, \exists a \in A / F(g)a = a', \quad (66)$$

o grupo de estabilidade de H para um elemento $a_0 \in A$ é aquele para o qual a_0 é invariante:

$$F(h)a_0 = a_0. \quad (67)$$

(*Obs*: quanto as definições detalhadas de espaço homogêneo e atuação transitiva, ver [25].)

No nosso caso, o grupo de estabilidade que mantém a física invariante é todo aquele que faz o estado evoluir apenas por uma fase, em razão da invariância de gauge. Adiantamos que este grupo será um subgrupo isomorfo ao $U(N - 1)$ oriundo da decomposição do grupo $SU(N)$, sendo N o número de níveis do sistema, neste caso, um *subgrupo de estabilidade*. Quando eliminarmos este setor que não contribui para a fase geométrica, quocientando a evolução temporal $SU(N)$ pelo subgrupo de estabilidade, esta operação

gerará uma única representação no espaço dos estados que diferem por uma fase, isto é, de estados que mantêm entre si uma relação de equivalência. Pelo teorema da partição, cada ponto no espaço representará um estado distinto.

Munidos com estas ideias, buscaremos interpretar a fase geométrica de um qubit no espaço de estados.

3.4 Análise topológica: o primeiro e o segundo grupos de homotopia

O espaço topológico \mathcal{X} é um conjunto de pontos com tais propriedades na vizinhança de cada ponto, no qual funções, contidas no espaço, podem ser continuamente deformadas uma sobre a outra. Um mapa é uma função entre dois espaços que conserva a continuidade. Um mapa de S^1 em \mathcal{X} é uma curva que pode ser deformada continuamente. Quando a curva é fechada e orientada, baseada em um único ponto fixo, o mapa é dito um laço. Um mapa de S^2 em \mathcal{X} é uma superfície. E assim por diante. O primeiro grupo de homotopia trata da deformação de curvas fechadas.

Primeiramente, convém ilustrarmos o conceito básico do primeiro grupo de homotopia. Na Fig. (6), a curva fechada C_2 pode ser continuamente deformada a um único ponto. Denominamos este laço de laço identidade. Porém, a curva C_1 contém um buraco no seu interior, logo não pode ser deformada continuamente a um ponto. Dizemos, com isso, que o primeiro grupo de homotopia da superfície S_o é não-trivial, $\Pi_1(S_o) \neq 0$. Se o buraco fosse preenchido, de modo que toda curva fechada na nova superfície S pudesse ser deformada continuamente a um ponto, o primeiro grupo de homotopia seria trivial, $\Pi_1(S) = 0$.

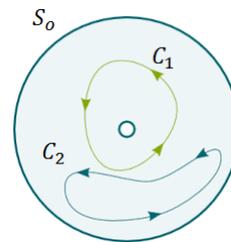


Figura 6: $\Pi_1(\mathcal{C})$

A partir destes conceitos, o primeiro grupo de homotopia de uma casca esférica S^2 é trivial, pois qualquer curva fechada na sua superfície poder ser continuamente deformada a um ponto, $\Pi_1(S^2) = 0$.

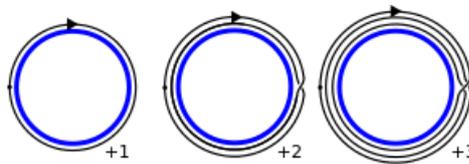


Figura 7: homotopia de S^2

Em todo caso, o que confere à homotopia estrutura de grupo? Um dos exemplos esclarecedores é a análise dos grupos de homotopia de um círculo e

de uma casca esférica. Para isto, lembremos a definição do grupo \mathbf{Z} , o grupo dos inteiros: ele é um isomorfo ao primeiro grupo de homotopia de um círculo. O primeiro grupo de homotopia de um círculo resume o número de formas diferentes que um caminho em S^1 pode ser mapeado continuamente sobre o círculo. A homotopia não difere dois mapas se um pode ser continuamente deformado no outro.

Na representação complexa de um círculo de raio unitário, a curva que habita a circunferência é $f(t) = e^{ig(t)}$. Se, no intervalo temporal $[0, 1]$, a curva $g(t)$ evolui continuamente de $g(0)$ a $g(1)$, escolhendo $g(0) = 0$, a fase no instante final pode assumir os valores $g(1) = 2\pi n$, $n \in \mathbf{Z}$, tal que $n = \{0, \pm 1, \pm 2, \dots\}$ representa o número de voltas ao redor do círculo, podendo ser qualquer número inteiro. (A figura ao lado ilustra as voltas no círculo complexo no sentido horário, definido como positivo.) Assim, dizemos que o primeiro grupo de homotopia de um círculo são os inteiros:



$$\Pi_1(S^1) = \mathbf{Z}. \quad (68)$$

Figura 8: $\Pi_1(S^1)$

Se fôssemos fazer um gráfico de $g(t)$, ele seria dado por n curvas que, no instante final, chegariam em n pontos discretos, $\{0, \pm 2\pi, \pm 4\pi, \dots\}$, de modo que cada curva não pode ser continuamente deformada uma na outra, configurando n classes de equivalência distintas.

Por outro lado, o segundo grupo de homotopia trata da deformação de superfícies. Se uma superfície fechada conter um buraco no seu interior, o segundo grupo de homotopia não será trivial, analogamente ao caso das curvas fechadas. Porém, se puder ser continuamente deformada em um único ponto, contornando quaisquer buracos que existam no espaço topológico, o segundo grupo de homotopia não será trivial. Um círculo livre para se deformar em um espaço tridimensional, por exemplo, possui o segundo grupo de homotopia nulo,

$$\Pi_2(S^1) = 0, \quad (69)$$

pois mesmo que exista um buraco no seu interior, ele pode contorná-lo e ser deformado em um único ponto.

A mesma lógica para determinar o primeiro grupo de homotopia de S^1 como os inteiros pode ser usada para encontrar o segundo grupo de homotopia de uma casca esférica S^2 . A casca esférica pode ser *embrulhada* uma, ou duas, ou n vezes. Os inteiros indicam o número de vezes que a casca foi embrulhada, podendo ser positivos ou negativos, denotando o sentido do *embrulho*, de

modo que o segundo grupo de homotopia de S^2 são os inteiros:

$$\Pi_2(S^2) = \mathbf{Z}. \quad (70)$$

A análise topológica será importante na interpretação da fase geométrica de um qubit no espaço de estado, e na relação que este espaço mantém com o espaço projetivo CP^1 . Esta construção, provavelmente, possui análogos em sistema de nível superior, que poderão ser úteis para uma interpretação generalizada da fase geométrica, conforme a relação dos objetos geométricos projetados no espaço de estado e a topologia do espaço projetivo CP^{N-1} em sistemas de N níveis.

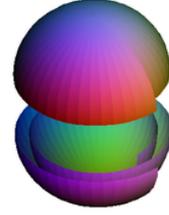


Figura 9: $\Pi_2(S^2)$

3.5 O espaço projetivo e o subgrupo de estabilidade da fase geométrica de um qubit

Conseguimos decompor a matriz \hat{S} , que pertence ao $SU(2)$, em duas matrizes, (ver eq. (55)). A segunda matriz, chamando $z = e^{i\chi_1}$, possui a forma:

$$\begin{pmatrix} z & 0 \\ 0 & \bar{z} \end{pmatrix}. \quad (71)$$

O isomorfismo entre dois grupos G_1 e G_2 existe quando um mapa bijectivo $f : G_1 \rightarrow G_2$ é consistente com as operações

$$f(g_1 * g_2) = f(g_1).f(g_2) \quad \text{e} \quad [f(g)]^{-1} = f(g^{-1}). \quad (72)$$

Na matriz acima, ambas as condições, unitariedade e determinante unitário, são confirmadas pela mesma condição que caracteriza o grupo $U(1)$, ou seja, $z\bar{z} = 1$. O mesmo acontece com a inversa e o elemento neutro, enfim, todas as propriedades em $SU(2)$ desta matriz levam internamente às propriedades do grupo $U(1)$, de modo que este subgrupo é isomorfo a $U(1)$.

A estrutura de grupo garante que a operação é fechada, $z = z_1 z_2 \in U(1)$, assegura a existência da identidade e da matriz inversa, além da propriedade associativa. Estas ferramentas conduzem a relação de equivalência $\hat{S}' \sim \hat{S}$, se

$$\hat{S}' = S \begin{pmatrix} z & 0 \\ 0 & \bar{z} \end{pmatrix}. \quad (73)$$

De fato, é fácil verificar as propriedades reflexiva, simétrica e transitiva: (I) \hat{S}' é levada na própria S pela identidade ($z = 1$ se $\chi_1 = 0$); (II) aplicando a inversa dos dois lados, se \hat{S}' se relaciona com \hat{S} via $z = e^{i\chi_1}$, então \hat{S} se relaciona com \hat{S}' via $z = e^{-i\chi_1}$ e, por último, (III) se \hat{S}' se relaciona com \hat{S}

via $z_1 = e^{i\chi_1}$ e \hat{S} se relaciona com \hat{S}'' via $z_2 = e^{i\chi_2}$, então \hat{S}' se relaciona com \hat{S}'' via $z_3 = e^{i\chi_3}$, com $\chi_3 = \chi_1 + \chi_2$.

Eliminar, por assim dizer, o setor isomorfo ao $U(1)$ implica, na verdade, em identificar todas as matrizes que são relacionadas pela equivalência acima, quocientado pelo subgrupo de estabilidade $H \in SU(N)$ capaz de produzir apenas fases,

$$H = \{h \in SU(N) / h|\Psi(0)\rangle = e^{if}|\Psi(0)\rangle\}, \quad (74)$$

de modo que

$$\hat{S}_{quo} = \begin{pmatrix} |\alpha| & \gamma \\ -\bar{\gamma} & |\alpha| \end{pmatrix} \equiv SU(2)/U(1) \quad (75)$$

representa todos os estados físicos acessíveis ao sistema.

Desta forma, caracterizamos o subgrupo de estabilidade de um qubit dado pelo conjunto de matrizes \hat{S}_{sub} tais que, aplicadas ao ket $|\Psi(0)\rangle$,

$$\hat{S}_{sub} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = e^{if_1} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad (76)$$

analogamente, para o estado inicial $|2\rangle$,

$$\hat{S}_{sub} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = e^{if_2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (77)$$

O qubit cuja evolução é descrita por \hat{S}_{quo} pertence ao espaço projetivo CP^1 , (CP^{n-1} é uma variedade do espaço dos complexos de dimensão real $2n - 1$, quer dizer, o espaço complexo de dimensão n a menos de uma fase; neste caso, $n = 2$). No caso da evolução do estado inicial $|1\rangle$, o qubit mais geral é:

$$|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix} = e^{if} \begin{pmatrix} |\alpha| \\ \gamma \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} |\alpha| \\ \gamma \end{pmatrix}, \quad (78)$$

sendo z_1 , z_2 e γ números complexos, (com $\gamma = z_2 e^{-if}$). Aplicando a unitariedade de $|\Psi\rangle$ ou do determinante da \hat{S}_{quo} , temos

$$|\alpha|^2 + \gamma\bar{\gamma} = 1. \quad (79)$$

Como $|\alpha| \geq 0$, a eq. (26) representa uma semicasca esférica de raio unitário. Assumindo que na mecânica quântica o espaço projetivo é um espaço topológico em que cada ponto representa estados físicos distintos, a semicasca esférica é a representação do espaço projetivo de um qubit, CP^1 , donde o primeiro grupo de homotopia de CP^1 será nulo,

$$\Pi_1(CP^1) = 0, \quad (80)$$

visto que qualquer caminho fechado sobre a semicasca pode ser degenerado continuamente a um único ponto.

Agora, se $|\alpha| = 0$, os estados habitarão a circunferência de raio unitário no plano $\gamma\bar{\gamma} = 1$, a borda da semicasca. Neste caso,

$$\hat{S}_{quo} = \begin{pmatrix} 0 & \gamma \\ -\bar{\gamma} & 0 \end{pmatrix},$$

cujo determinante será unitário se $|\gamma|^2 = 1$, *i.e.*, se $\gamma = e^{i\chi}$. Se tomarmos dois estados distintos que pertencem à borda, teremos

$$\hat{S}_1 = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\chi_1} \\ -e^{-i\chi_1} & 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \hat{S}_2 = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\chi_2} \\ -e^{-i\chi_2} & 0 \end{pmatrix},$$

mas \hat{S}_1 pode ser reescrita na forma

$$\hat{S}_1 = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\chi_2} \\ -e^{-i\chi_2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\chi} & 0 \\ 0 & e^{-i\chi} \end{pmatrix}, \quad \text{com} \quad \chi = \chi_2 - \chi_1, \quad (81)$$

a segunda matriz é exatamente o setor isomorfo ao $U(1)$ pertencente ao subgrupo de estabilidade que pode ser quocientada, assim $\hat{S}_1 \sim \hat{S}_2$. Como os dois pontos são arbitrários, esta equivalência vale para todos os pontos que habitam a borda da casca.

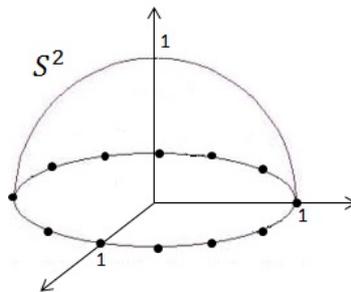


Figura 10: espaço projetivo CP^1

Em suma, após quocientar o subgrupo de estabilidade, o espaço projetivo de um qubit é dado por uma semicasca esférica de raio unitário com todos os pontos da circunferência da borda identificados (que representam o mesmo estado físico), portanto,

$$CP^1 = SU(2)/U(1) = S^2; \quad (82)$$

em outras palavras, a semicasca com a borda identificada é topologicamente idêntica a uma casca esférica, visto que todos os pontos identificados podem

ser reunidos em um único ponto. Consequentemente, o segundo grupo de homotopia CP^1 não é trivial,

$$\Pi_2(CP^1) = \Pi_2(S^2) = \mathbf{Z}; \quad (83)$$

de modo que, no transcorrer da evolução temporal, o estado habitará uma casca esférica de raio unitário. Isto ficará mais claro na seção seguinte, na qual estudaremos a relação entre o vetor de Bloch e a fase geométrica.

4 Comportamento da fase geométrica para as evoluções $SU(2)$

4.1 Das evoluções descritas por hamiltonianos pertencentes à álgebra $SU(2)$

Tudo o que fizemos para calcular a fase geométrica no caso da interação de uma partícula de spin $\frac{1}{2}$ com o campo magnético pode ser rigorosamente refeito para uma partícula de spin qualquer. Se, ao invés de uma partícula de spin $\frac{1}{2}$, tivéssemos uma partícula de spin 1 interagindo com o campo, substituindo nos cálculos anteriores as matrizes de Pauli pelas matrizes

$$S_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad S_z = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\sqrt{2} \end{pmatrix}, \quad (84)$$

calculando a fase geométrica para o estado característico com a maior energia, chegaríamos à relação $\gamma_g = -\Omega$, sendo Ω o ângulo sólido descrito pelas variações das componentes do campo no espaço dos parâmetros. Fazendo o mesmo para uma partícula de spin $\frac{3}{2}$, encontraríamos $\Omega_g = -\frac{3}{2}\Omega$, de modo que, após sucessivos cálculos para diferentes spins, reconheceríamos a recorrência cuja relação conclusiva entre a fase geométrica e o ângulo sólido subentendido no espaço dos parâmetros, para uma partícula de spin s interagindo com o campo magnético, é

$$\gamma_g = -s\Omega. \quad (85)$$

Demonstramos, há pouco, que a evolução geral de um qubit pode ser interpretada como um ângulo sólido no espaço de estado, sendo os ângulos da parametrização definidos como os ângulos polar e azimutal neste espaço. Este resultado generalizou a relação $\gamma_g = -\frac{1}{2}\Omega$ para qualquer evolução temporal para um sistema de dois níveis.

Agora, poderemos fazer o caminho inverso, visto que o resultado geral da fase possui a mesma forma do caso particular de uma partícula de spin $\frac{1}{2}$ sob ação de um campo magnético, e afirmar que todo sistema de dois níveis, parametrizados por θ e ϕ , deve possuir um hamiltoniano que pode ser expresso em função de uma combinação linear dos geradores da álgebra $SU(2)$, quer dizer, das matrizes de Pauli:

$$H = \xi^a \sigma_a, \quad [\sigma_a, \sigma_b] = 2i\epsilon_{abc}\sigma_c; \quad (86)$$

com a combinação definida pelo produto escalar entre $\vec{\sigma} = \sigma_1\hat{x} + \sigma_2\hat{y} + \sigma_3\hat{z}$ e um vetor $\vec{v}(\theta, \phi) = v_0\hat{n}(\theta, \phi)$, orientado (no espaço de estados) segundo os ângulos θ e ϕ da parametrização, definidos como ângulos polar e azimutal em relação ao eixo que acompanha o gerador da álgebra de Cartan, σ_z , na definição de $\vec{\sigma}$. Assim, chamando $\vec{\Sigma} = v_0\vec{\sigma}$, o hamiltoniano geral de um qubit toma a forma:

$$H = \vec{\Sigma} \cdot \hat{n}(\theta, \phi). \quad (87)$$

Em todo caso, não podemos generalizar a relação entre sistemas de dois níveis e spin $\frac{1}{2}$ para uma relação entre sistemas de N níveis e algum spin superior. Se assumíssemos que o hamiltoniano expresso como uma combinação dos geradores da álgebra de $SU(2)$ são os responsáveis por gerar a relação $\gamma_g = -s\Omega$, no caso de um sistema de três níveis, por exemplo, ao usarmos as matrizes S_x , S_y e S_z da eq. (84), que são uma representação 3×3 da álgebra $SU(2)$, no lugar das matrizes de Pauli em $\vec{\Sigma}$, analogamente ao caso de uma partícula de spin 1 interagindo com o campo, encontraremos a fase geométrica $\gamma_g = -\Omega$. Mas, em contrapartida, se usarmos a subálgebra de $SU(2)$ oriunda dos geradores da álgebra $SU(3)$, as matrizes de Gell-Mann

$$\lambda_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix};$$

$[\lambda_i, \lambda_j] = i\epsilon_{ijk}\lambda_k$, encontraremos novamente a relação $\gamma_g = -\frac{1}{2}\Omega$. Enfim, ao sairmos do sistema de dois níveis, além de não ser um caso geral para qualquer evolução, a relação varia conforme a representação da álgebra, de modo que a eq. (87) aplicada a níveis superiores a dois é insuficiente para descrever de forma generalizada até mesmo este caso particular.

Na intenção de evitar inconvenientes desta natureza, sempre que tratarmos de um sistema de N níveis, estudaremos a álgebra $SU(N)$ representada unicamente por matrizes $N \times N$, e não restritas a subálgebras contidas em sua estrutura interna, como no caso da subálgebra $SU(2)$ representada por matrizes 3×3 . Para evoluções $SU(2)$, nos restringiremos a matrizes de ordem dois, e assim sucessivamente.

4.2 A fase geométrica de um qubit e o papel do vetor de Bloch

A eq. (87) é geral para um sistema de dois níveis. O hamiltoniano da eq. (35) indica o modelo perfeito para generalização da fase de um qubit. O vetor $\vec{v}(\theta, \phi)$ funciona de forma análoga ao vetor campo magnético na interação da partícula com \vec{B} . Ele descreve um caminho \mathcal{C} no espaço de estados tal como \vec{B} no estado dos parâmetros (ver Fig. 11), que guiará a trajetória do vetor unitário $\hat{n}(\theta, \phi)$ sobre uma superfície esférica de raio unitário, desenhando nesta a borda que circunscreve o ângulo sólido que define a fase geométrica. O ângulo polar θ pode variar no intervalo $[0, \pi)$, de modo que \vec{v} pode projetar ângulos sólidos ao longo de toda a casca esférica.

No caso do espaço projetivo CP^1 , garantimos que $\frac{\theta}{2} \in [0, \frac{\pi}{2})$, já que, na matriz $SU(2)/U(1)$ (eq. (56)), $\cos \frac{\theta}{2}$ e $\sin \frac{\theta}{2}$ representavam módulos de vetores complexos, isto é, tinham que ser positivos. Daí definirmos o intervalo de θ em $[0, \pi)$. Além de garantir a positividade dos módulos, este intervalo é necessário para evitar sobrecontagens no espaço de estado, de modo que cada ponto da superfície esférica indique um único estado físico. A Fig. 11 é uma representação geral da fase geométrica de um qubit.

Resumidamente, o vetor unitário da Fig. (11), denominado vetor de Bloch, é livre para se mover por toda a superfície da esfera unitária (a esfera de Bloch, ver [26]), sendo responsável por descrever o ângulo sólido no espaço de estados. Por sua vez, o vetor de Bloch é gerado pela ação adjunta do subgrupo $S_{quo} = SU(2)/U(1)$ sobre a matriz de Pauli σ_z ,

$$S_{quo} \sigma_z S_{quo}^{-1} = \hat{n}(\theta, \phi) \cdot \vec{\sigma}, \quad (88)$$

donde encontramos:

$$\hat{n}(\theta, \phi)(t) = (\sin \theta(t) \cos \phi(t), \sin \theta(t) \sin \phi(t), \cos \theta(t)); \quad (89)$$

$\hat{n} \in S^2$, (variar o módulo de \vec{v} , v_0 , não altera a fase geométrica). Por esta expressão, a fase geométrica pode ser reescrita na forma:

$$\gamma_g = \frac{1}{2} \int_{S(\mathcal{C})} d\theta d\phi \hat{n} \cdot \left(\frac{\partial \hat{n}}{\partial \theta} \times \frac{\partial \hat{n}}{\partial \phi} \right); \quad (90)$$

$\theta \in [0, \pi)$ e $\phi \in [0, 2\pi)$, (ver [27]). Esta forma é válida somente para um sistema de dois níveis. Ela não reproduz os efeitos das variadas representações

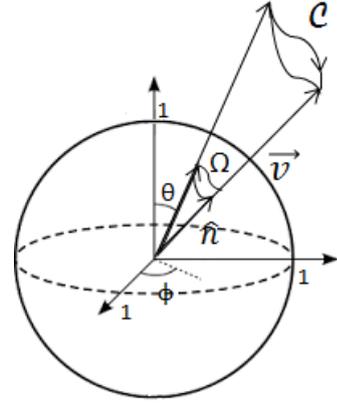


Figura 11: qubit

de subálgebras $SU(2)$ em sistema com mais de dois níveis. Tal expressão da fase será importante na generalização da fase para evoluções $SU(N)$ de sistemas de N níveis.

Em um sistema de dois níveis, a matriz densidade ρ mais geral de estados puros, isto é, que obedecem as condições

$$\text{Tr}\rho = 1 \quad \text{e} \quad \text{Tr}\rho^2 = 1, \quad (91)$$

também pode ser escrita em função do vetor de Bloch na forma

$$\rho = \frac{1}{2}(I_{2 \times 2} + \hat{n} \cdot \vec{\sigma}), \quad (92)$$

sendo $\vec{\sigma}$, da mesma forma, as matrizes de Pauli, que possuem a propriedade $\text{Tr}\{\sigma_i \sigma_j\} = 2\delta_{ij}$. A eq. (92) é uma consequência direta da eq. (91). O motivo do vetor de Bloch, neste caso, ser parametrizado por dois parâmetros resulta do fato da matriz densidade ser descrita por produtos externos, e, por conseguinte, também ser insensível a evoluções que contribuem apenas com uma fase. Os dois parâmetros são o resultado do descarte do setor isomorfo ao $U(1)$, analogamente ao caso da fase geométrica.

O vetor $\hat{n}(\theta, \phi)$ promove rotações em \mathcal{R}^3 contidas na superfície da esfera de Bloch. Num sistema de dois níveis, temos um vetor tridimensional. Esta característica é uma consequência da dimensão da álgebra. No caso das evoluções $SU(2)$, temos três matrizes de Pauli, daí o vetor ser tridimensional. O número de parâmetros é justificado pela parametrização do *coset* $SU(2)/U(1)$. Para evoluções $SU(3)$, por exemplo, teremos *vetores de Bloch* oito-dimensionais, – devido a dimensão $N^2 - 1$ da álgebra – que nós conseguiremos parametrizar com quatro parâmetros, suficientes para as evoluções $SU(3)/U(2)$, sendo este o único setor que contribuirá para a fase geométrica dado um estado inicial de nossa escolha, após decompor a evolução $SU(3)$, como será demonstrado em seguida.

A fim de generalizar a eq. (90), necessitaremos do teorema de Stokes generalizado em integrações de 1-formas, da mesma forma que usamos o teorema de Green para chegarmos à expressão do ângulo sólido para evolução de um qubit. A análise dos *vetores de Bloch* será importante para estendermos os conceitos da teoria e compreendermos a fase geométrica para a evolução de um sistema de N níveis.

5 Aspectos algébricos da fase geométrica via decomposição de evoluções $SU(N)$

5.1 A parametrização canônica dos *cosets* da decomposição de um grupo $SU(N)$

Os geradores da álgebra $SU(N)$ que pertencem à subálgebra de Cartan são aqueles que comutam entre si, ou seja, os geradores diagonais tais que:

$$[T_i, T_j] = 0. \quad (93)$$

Para um sistema de N níveis, existem $N - 1$ geradores diagonais pertencentes à subálgebra de Cartan. Num sistema de dois níveis, existe apenas um, a matriz de Pauli σ_z . Uma matriz S pertencente ao $SU(2)$ pode ser decomposta em

$$S = SU(2)/U(1) \times U(1). \quad (94)$$

O setor isomorfo a $U(1)$ pode ser escrito na forma

$$\begin{pmatrix} e^{i\chi} & 0 \\ 0 & e^{-i\chi} \end{pmatrix} = e^{i\chi\sigma_z}, \quad (95)$$

(relação obtida usando a expansão em série de Taylor e a propriedade $\sigma_z^2 = 1$), e assim, para dois níveis, chamando $SU(2)/U(1) = \Omega^{(2;2)}$ e $\Omega^{(1;2)} = U(1) = e^{i\chi\sigma_z}$, e usando a parametrização da eq. (56):

$$S = \Omega^{(2;2)}\Omega^{(1,2)} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & \sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi} \\ -\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\phi} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} e^{i\chi\sigma_z}. \quad (96)$$

A ideia é generalizar a decomposição em *cosets* para uma matriz S pertencente ao grupo $SU(N)$, seguindo a estrutura:

$$S = \Omega^{(N;N)}\Omega^{(N-1;N)} \dots \Omega^{(2;N)}\Omega^{(1;N)}, \quad (97)$$

sendo cada *coset* $\Omega^{(m;N)}$ matrizes em $SU(N)$.

Se pensarmos em um sistema de três níveis, $S \in SU(3)$, teremos dois geradores diagonais na álgebra de Cartan:

$$T_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad T_2 = \frac{1}{2\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}. \quad (98)$$

Na busca da generalização, devemos decompor a matriz $S \in SU(3)$ em três setores:

$$\hat{S} = \Omega^{(3;3)}\Omega^{(2;3)}\Omega^{(1;3)},$$

com o *coset* $\Omega^{(1;3)}$ escrito em função dos geradores diagonais T_1 e T_2 na forma

$$\Omega^{(1;3)} = e^{i\chi_1 T_1} e^{i\chi_2 T_2}, \quad (99)$$

enquanto a $\Omega^{(2;3)}$, que representa o setor isomorfo a $SU(2)/U(1)$, pode ser escrito pela estrutura:

$$\Omega^{(2;3)} = \left(\begin{array}{c|c} SU(2)/U(1) & O \\ \hline O^T & 1 \end{array} \right); \quad (100)$$

(sendo O o vetor nulo de duas componentes e a parametrização de $SU(2)/U(1)$ já conhecida).

Primeiramente, lembremos que o grupo $SU(3)$ possui 8 dimensões. Cada exponencial carrega um parâmetro, χ_1 e χ_2 , enquanto a $SU(2)/U(1)$ é descrita por dois parâmetros. Portanto, o problema consiste em representar a $\Omega^{(3;3)}$ com os quatro parâmetros restantes, com as propriedades

$$\det \Omega^{(3;3)} = 1; \quad \Omega^{(3;3)\dagger} \Omega^{(3;3)} = 1.$$

Isto pode ser feito com uma parametrização adequada. A $\Omega^{(3;3)}$ é uma $SU(3)$ quocientada por um setor isomorfo ao $U(2)$, isto é, $\Omega^{(3;3)} = SU(3)/U(2)$. Efetuando o mesmo procedimento para qualquer matriz $SU(N)$ e ajustando as parametrizações, a generalização da decomposição em *cosets* para qualquer dimensão possui as seguintes definições [28]:

$$\Omega^{(1;N)} = e^{i\chi_1 T_1} e^{i\chi_2 T_2} \dots e^{i\chi_{N-1} T_{N-1}}, \quad (101)$$

um setor composto por $N - 1$ matrizes isomorfas a $U(1)$, contendo, no total, $N - 1$ parâmetros, tal que, rigorosamente,

$$\Omega^{(1;N)} \in T^{N-1}, \quad (102)$$

onde o toro $(N - 1)$ -dimensional T^{N-1} é o produto de $N - 1$ esferas $S^1 = T^1$; enquanto χ_i , para $\{i = 1, \dots, N - 1\}$, são parâmetros reais e T_i , os geradores da subálgebra de Cartan.

Por outro lado, as outras $\Omega^{(m;N)}$, $m \neq 1$, podem ser expressas por

$$\Omega^{(m;N)} = \left(\begin{array}{c|c} SU(m)/U(m-1) & O \\ \hline O^T & I_{N-m} \end{array} \right), \quad (103)$$

sendo O a matriz nula $m \times (N - m)$ e I_{N-m} a matriz identidade de ordem $N - m$. O espaço *coset* $SU(m)/U(m-1)$ possui dimensão $2(m-1)$ e é capaz de garantir a unitariedade de $\Omega^{(m;N)}$ com o número adequado de parâmetros pela estrutura em blocos:

$$SU(m)/U(m-1) = \left(\begin{array}{c|c} \cos \sqrt{BB^\dagger} & B \frac{\sin \sqrt{B^\dagger B}}{\sqrt{B^\dagger B}} \\ \hline -\frac{\sin \sqrt{B^\dagger B}}{\sqrt{B^\dagger B}} B^\dagger & \cos \sqrt{B^\dagger B} \end{array} \right), \quad (104)$$

onde $B = B^{(m)}$ representa um vetor complexo de $m - 1$ componentes,

$$B^{(m)} = (\gamma_1^{(m)} e^{i\xi_1^{(m)}}, \gamma_2^{(m)} e^{i\xi_2^{(m)}}, \dots, \gamma_{m-1}^{(m)} e^{i\xi_{m-1}^{(m)}})^T. \quad (105)$$

Para $m \neq 1$, portanto, temos os *cosets*

$$\Omega^{(m,N)} \in \frac{U(m) \otimes T^{N-m}}{U(m-1) \otimes T^{N-m+1}}.$$

A estrutura em blocos é sugestiva, mas não trivial. O primeiro termo, para $m > 2$, possui o cosseno de uma matriz. A demonstração geral exige tempo e cuidado. Para compreendermos melhor o processo, é útil fazer alguns exemplos:

I) Para $N = 2$,

$$S = \Omega^{(2,2)} \Omega^{(1,2)}; \quad S \in SU(2);$$

pela definição, $\Omega^{(1,2)} = e^{i\sigma_z}$ e, pela estrutura em blocos, $\Omega^{(2,2)} = SU(2)/U(1)$, donde infere-se que a definição de I_0 indica a não existência da última linha e da última coluna. O vetor com saídas complexas $B^{(2)}$ possui dimensão 1, ou seja, é um número complexo,

$$B^{(2)} = \gamma_1^{(2)} e^{i\xi_1^{(2)}};$$

tal que $\sqrt{B^\dagger B} = \sqrt{BB^\dagger} = \gamma_1^{(2)}$. Substituindo na expressão para $SU(m)/U(m-1)$, com $m = 2$,

$$\Omega^{(2,2)} = SU(2)/U(1) = \left(\begin{array}{cc} \cos \gamma_1^{(2)} & \sin \gamma_1^{(2)} e^{i\xi_1^{(2)}} \\ -\sin \gamma_1^{(2)} e^{-i\xi_1^{(2)}} & \cos \gamma_1^{(2)} \end{array} \right), \quad (106)$$

conforme vimos nas secções anteriores, ao quocientar a matriz S , pertencente ao $SU(2)$, pelo setor isomorfo ao $U(1)$; (reconhecendo $\gamma_1^{(2)} = \frac{\theta}{2}$). Observemos

que $\Omega^{(1,2)}$ carrega um parâmetro, e a $\Omega(2,2)$, dois; de modo que no total temos três parâmetros, determinados pela dimensão de $SU(2)$.

II) Para $N=3$,

$$S = \Omega^{(3,3)}\Omega^{(2,3)}\Omega^{(1,3)}; \quad S \in SU(3);$$

novamente, pela definição, $\Omega^{(1,3)} = e^{i\chi_1 T_1} e^{i\chi_2 T_2}$, carregando dois parâmetros. Enquanto, pela segunda definição, a $\Omega^{(2,3)}$ recupera a eq. (100). A forma de $SU(2)/U(1)$ está expressa acima, agora com os dois novos parâmetros correspondentes. Resta-nos os quatro parâmetros da $\Omega^{(3,3)} = SU(3)/S(2)$. Neste caso, o vetor $B^{(3)}$ possui duas dimensões:

$$B^{(3)} = \begin{pmatrix} \gamma_1^{(3)} e^{i\xi_1^{(3)}} \\ \gamma_2^{(3)} e^{i\xi_2^{(3)}} \end{pmatrix};$$

contendo, portanto, os parâmetros restantes: $\gamma_1^{(3)}, \xi_1^{(3)}, \gamma_2^{(3)}, \xi_2^{(3)}$; tais que, (desconsiderando, por agora, o índice superior para simplificar a notação):

$$B^\dagger B = \gamma_1^2 + \gamma_2^2; \quad BB^\dagger = \begin{pmatrix} \gamma_1^2 & \gamma_1 \gamma_2 e^{i(\xi_1 - \xi_2)} \\ \gamma_1 \gamma_2 e^{-i(\xi_1 - \xi_2)} & \gamma_2^2 \end{pmatrix}.$$

O único termo da estrutura em blocos que exige atenção é o cosseno da raiz da matriz BB^\dagger ; os outros termos são imediatos. Para calcular este termo, devemos expandir o cosseno em série de Taylor. Feito isto, a raiz desaparece. Sobra uma soma infinita de matrizes elevadas ao índice de soma n . Diagonalizando-a, $BB^\dagger = PDP^\dagger$, ($P^{-1} = P^\dagger$), sendo D a matriz diagonal com os autovalores de BB^\dagger , o termo do somatório se torna $PD^n P^{-1}$, e, tomando cuidado para não descontar o termo $n = 0$, que não é reproduzido quando extraímos P e P^{-1} para fora da soma, encontramos a matriz 2×2 $\cos \sqrt{BB^\dagger}$, que forma o primeiro bloco. Por fim, substituindo tudo,

$$\Omega^{(3;3)} = \begin{pmatrix} 1 + \frac{\gamma_1^2 (\cos \sqrt{\gamma_1^2 + \gamma_2^2} - 1)}{\gamma_1^2 + \gamma_2^2} & \frac{\gamma_1 \gamma_2 (\cos \sqrt{\gamma_1^2 + \gamma_2^2} - 1)}{\gamma_1^2 + \gamma_2^2} e^{i(\xi_1 - \xi_2)} & \frac{\gamma_1 \sin \sqrt{\gamma_1^2 + \gamma_2^2}}{\sqrt{\gamma_1^2 + \gamma_2^2}} e^{i\xi_1} \\ \frac{\gamma_1 \gamma_2 (\cos \sqrt{\gamma_1^2 + \gamma_2^2} - 1)}{\gamma_1^2 + \gamma_2^2} e^{-i(\xi_1 - \xi_2)} & 1 + \frac{\gamma_2^2 (\cos \sqrt{\gamma_1^2 + \gamma_2^2} - 1)}{\gamma_1^2 + \gamma_2^2} & \frac{\gamma_2 \sin \sqrt{\gamma_1^2 + \gamma_2^2}}{\sqrt{\gamma_1^2 + \gamma_2^2}} e^{i\xi_2} \\ -\frac{\gamma_1 \sin \sqrt{\gamma_1^2 + \gamma_2^2}}{\sqrt{\gamma_1^2 + \gamma_2^2}} e^{-i\xi_1} & -\frac{\gamma_2 \sin \sqrt{\gamma_1^2 + \gamma_2^2}}{\sqrt{\gamma_1^2 + \gamma_2^2}} e^{-i\xi_2} & \cos \sqrt{\gamma_1^2 + \gamma_2^2} \end{pmatrix}; \quad (107)$$

uma matriz 3×3 , parametrizada por quatro parâmetros, que é unitária com determinante unitário: $\Omega^{(3,3)}\Omega^{(3,3)\dagger} = 1$, $\det \Omega^{(3,3)} = 1$, exatamente o que procurávamos. O método funciona para gerar a decomposição em *cosets* de qualquer matriz pertencente ao $SU(N)$.

5.2 Invariância da física concernente à fase geométrica para um sistema de N níveis

Como vimos, uma matriz S , pertencente ao grupo $SU(N)$, pode ser decomposta pela eq. (97), donde os $\Omega^{(1,N)}$, dados por

$$\Omega^{(1,N)} = \prod_{i=1}^{N-1} e^{i\chi_i T_i} = e^{i\sum_{i=1}^{N-1} \chi_i T_i} \quad (108)$$

para os $N - 1$ geradores da álgebra de Cartan, de acordo com a eq. (101), não contribuem para a fase geométrica quando escrevemos o estado inicial na sua própria base. Ao atuarem em $|\Psi(0)\rangle$, são capazes de gerar apenas fases. (A eq. (108) é sempre verdadeira pois $[T_i, T_j] = 0 \forall$ par $\{i, j\}$). Toda informação da física envolvendo a fase geométrica se concentra nos termos restantes da decomposição. Agora, pela parametrização da $\Omega^{(2,2)}$, obtida pela decomposição de uma evolução $SU(2)$, obtemos a transformada aplicada ao gerador da álgebra de Cartan:

$$\Omega^{(2,2)\dagger} \sigma_z \Omega^{(2,2)} = \sin 2\gamma_1^{(2)} \cos \xi_1^{(2)} \sigma_x - \sin 2\gamma_1^{(2)} \sin \xi_1^{(2)} \sigma_y + \cos 2\gamma_1^{(2)} \sigma_z;$$

sendo σ_x , σ_y e σ_z as matrizes de Pauli, os geradores da álgebra de matrizes hermitianas de traço nulo.

Definindo o vetor $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)^T$ e o vetor unitário

$$\hat{n} = (\sin 2\gamma_1^{(2)} \cos \xi_1^{(2)}, -\sin 2\gamma_1^{(2)} \sin \xi_1^{(2)}, \cos 2\gamma_1^{(2)}), \quad (109)$$

que define uma casca esférica de raio unitário no espaço dos parâmetros, a transformada acima pode ser reescrita pelo produto escalar entre $\vec{\sigma}$ e \hat{n} ,

$$\Omega^{(2,2)} \sigma_z \Omega^{(2,2)\dagger} = \hat{n} \cdot \vec{\sigma}. \quad (110)$$

Consequentemente, a evolução do estado de dois níveis pela decomposição canônica, $|\Psi(t)\rangle = \hat{S}|\Psi(0)\rangle = \Omega^{(2,2)} e^{i\chi_1 \sigma_z} |\Psi(0)\rangle$, toma a forma alternativa:

$$|\Psi(t)\rangle = e^{i\chi_1 \hat{n} \cdot \vec{\sigma}} \Omega^{(2,2)} |\Psi(0)\rangle. \quad (111)$$

(A demonstração é imediata, basta inserir uma identidade, $\Omega^{(2,2)\dagger} \Omega^{(2,2)}$, entre $e^{i\chi_1 \sigma_z}$ e $|\Psi(0)\rangle$, e usar a propriedade $U e^{iA} U^{-1} = e^{iU A U^{-1}}$, oriunda da expansão em série de Taylor.)

Através desta decomposição alternativa e a invariância da fase sob a ação de $e^{i\chi_1 \sigma_z}$, percebemos que o primeiro termo funciona como uma espécie de

calibre para a fase geométrica, já que toda informação sobre a física está contida no termo $\Omega^{(2,2)}$. Passo a passo,

$$e^{i\chi_1\sigma_z}|\Psi(0)\rangle \sim |\Psi(0)\rangle,$$

logo,

$$|\Psi(t)\rangle = e^{i\chi_1\hat{n}\cdot\vec{\sigma}}\Omega^{(2,2)}|\Psi(0)\rangle \sim e^{i\chi_1\hat{n}\cdot\vec{\sigma}}\Omega^{(2,2)}e^{i\chi_1\sigma_z}|\Psi(0)\rangle = e^{i\chi_1\hat{n}\cdot\vec{\sigma}}|\Psi(t)\rangle;$$

comparando o primeiro e o último termo, concluímos que a fase geométrica é invariante sob a transformação

$$|\Psi(t)\rangle \rightarrow e^{i\chi_1\hat{n}\cdot\vec{\sigma}}|\Psi(t)\rangle. \quad (112)$$

Para demonstrar este resultado explicitamente, calculando-o diretamente pela expressão da fase geométrica, precisaremos usar as propriedades trigonométricas do vetor unitário \hat{n} , gerados pela transformada $\Omega^{(2,2)}\sigma_z\Omega^{(2,2)\dagger} = \hat{n}\cdot\vec{\sigma}$. Ao aplicarmos $e^{i\chi_1\hat{n}\cdot\vec{\sigma}}$ em um $|\Psi(t)\rangle$ arbitrário, a visualização da invariância não é evidente.

Para um sistema de três níveis, devemos considerar dois geradores da subálgebra de Cartan. Usando a base de Gell-Mann como representação geral de uma matriz hermitiana de traço nulo, estes dois geradores, T_1 e T_2 , são dados pela eq. (98). (Escolhemos esta base pois ela facilitará cálculos futuros, quando a ortogonalidade do traço dos geradores,

$$Tr(T_i T_j) = \frac{1}{2}\delta_{ij}, \quad (113)$$

será importante para compreendermos os análogos dos vetor de Bloch em mais dimensões, neste caso, em 8, como veremos a seguir).

Ao aplicarmos a transformada no primeiro gerador da álgebra de Cartan, T_1 , usando a $\Omega^{(3,3)}$, o comportamento é análogo ao caso anterior. A transformada pôde ser escrita como uma combinação linear entre os 8 geradores da álgebra $SU(3)$, em suma, escrita na forma de um produto escalar definido por:

$$\Omega^{(3,3)}T_1\Omega^{(3,3)\dagger} = \vec{\alpha}_1 \cdot \vec{T}; \quad (114)$$

sendo $\vec{\alpha}_1$ um vetor oito-dimensional, $\vec{\alpha}_1 = (\alpha_1^{(1)}, \alpha_1^{(2)}, \dots, \alpha_1^{(8)})^T$, com todas as componentes reais, $\vec{\alpha}_1 \in R^8$, e $\vec{T} = (T_1, T_2, \dots, T_8)^T$ uma base formada pelos geradores seguindo a ordem:

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{2\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}; \quad (115)$$

de forma análoga ao sistema de dois níveis, no qual os geradores eram as matrizes de Pauli.

Os parâmetros reais da combinação, $\{\alpha_1^{(1)}, \alpha_1^{(2)}, \dots, \alpha_1^{(8)}\}$, são definidos pelos parâmetros $\xi_1^{(3)}, \xi_2^{(3)}, \gamma_1^{(3)}$ e $\gamma_2^{(3)}$ da parametrização de $\Omega^{(3,3)}$, tais que, desprezando por um momento o índice superior, e chamando $\sqrt{\gamma_1^2 + \gamma_2^2} = \gamma^{(2)}$, por meio da transformada, encontramos

$$\alpha_1^{(1)} = \frac{\gamma_1^4 \cos^2 \gamma^{(2)} + \gamma_2^4 + \gamma_1^2 \gamma_2^2 (-\cos^2 \gamma^{(2)} + 4 \cos \gamma^{(2)} - 1)}{\gamma^{(2)4}} - \frac{(\gamma_2^4 - \gamma_1^4) \sin^2 \gamma^{(2)}}{2\gamma^{(2)4}};$$

$$\alpha_1^{(2)} = \frac{\sqrt{3} (\gamma_2^4 - \gamma_1^4) \sin^2 \gamma^{(2)}}{2 \gamma^{(2)4}};$$

e, usando os fatores:

$$A_1 = \frac{(\gamma_1^3 \gamma_2 - \gamma_1 \gamma_2^3)(\cos \gamma^{(2)} - 1)^2}{\gamma^{(2)4}},$$

$$B_1 = -\frac{\gamma_1 \sin \gamma^{(2)}}{\gamma^{(2)}} + \frac{(\gamma_1 \gamma_2^2 - \gamma_1^3) \sin \gamma^{(2)} (\cos \gamma^{(2)} - 1)}{(\gamma^{(2)})^3},$$

$$C_1 = \frac{\gamma_2 \sin \gamma^{(2)}}{\gamma^{(2)}} - \frac{(\gamma_1^2 \gamma_2 - \gamma_2^3) \sin \gamma^{(2)} (\cos \gamma^{(2)} - 1)}{(\gamma^{(2)})^3},$$

os parâmetros restantes serão:

$$\alpha_1^{(3)} = A_1 \cos(\xi_1 - \xi_2), \quad \alpha_1^{(4)} = -A_1 \sin(\xi_1 - \xi_2);$$

$$\alpha_1^{(5)} = B_1 \cos \xi_1, \quad \alpha_1^{(6)} = -B_1 \sin \xi_1;$$

$$\alpha_1^{(7)} = C_1 \cos \xi_2, \quad \alpha_1^{(8)} = -C_1 \sin \xi_2. \quad (116)$$

Similarmente, ao efetuarmos a transformada do segundo gerador diagonal, T_2 , encontramos novamente uma combinação linear entre os oito geradores da base, com novos parâmetros na combinação. Desta forma, definindo o segundo vetor oito-dimensional $\vec{\alpha}_2 = (\alpha_2^{(1)}, \alpha_2^{(2)}, \dots, \alpha_2^{(8)})^T$, temos

$$\Omega^{(3,3)} T_2 \Omega^{(3,3)\dagger} = \vec{\alpha}_2 \cdot \vec{T}; \quad (117)$$

com os parâmetros reais da combinação, $\{\alpha_2^{(1)}, \alpha_2^{(2)}, \dots, \alpha_2^{(8)}\}$, determinados em função dos parâmetros da parametrização de $\Omega^{(3,3)}$ (ver Apêndice 1), analogamente à transformada de T_1 .

Podemos, com isso, discutir a invariância da física para um sistema de três níveis. Para uma evolução temporal $SU(3)$ de um estado $|\Psi(t)\rangle = \hat{S}|\Psi(0)\rangle$, segundo a decomposição canônica,

$$|\Psi(t)\rangle = \Omega^{(3,3)}\Omega^{(2,3)}e^{i\chi_1 T_1}e^{i\chi_2 T_2}|\Psi(0)\rangle;$$

a aplicação de $e^{i\chi_1 T_1}e^{i\chi_2 T_2}$ em $|\Psi(0)\rangle$ gera $e^{if}|\Psi(0)\rangle$. Escolhendo o estado inicial dado pela estado característico $(0, 0, 1)^T$, $\Omega^{(2,3)}|\Psi(0)\rangle = |\Psi(0)\rangle$, e, por conseguinte, podemos escrever a evolução do estado

$$|\Psi(t)\rangle = \Omega^{(3,3)}e^{i\chi_1 T_1}e^{i\chi_2 T_2}|\Psi(0)\rangle.$$

Observação. Este resultado é geral para a evolução de qualquer estado físico que se deseje representar pela decomposição. A decomposição não privilegia nenhuma escolha na ordem que dispõe os estados na representação dos estados característicos (escritos na própria base). Basta posicionar o estado de interesse de modo que $(0, 0, 1)^T$ o represente e, para cada escolha, reconhecer como os parâmetros $\xi_i^{(3)}$ e $\gamma_i^{(3)}$ da parametrização se relacionam com as grandezas físicas, o que obviamente dependerá da ordem escolhida, devido a configuração do hamiltoniano para cada escolha.

Assumindo isto, podemos inserir identidades na expressão de $|\Psi(t)\rangle$, analogamente ao caso da evolução $SU(2)$, em busca da decomposição alternativa. Desenvolvendo,

$$|\Psi(t)\rangle = [\Omega^{(3,3)}e^{i\chi_1 T_1}\Omega^{(3,3)\dagger}][\Omega^{(3,3)}e^{i\chi_2 T_2}\Omega^{(3,3)\dagger}]\Omega^{(3,3)}|\Psi(0)\rangle;$$

donde, elevando as omegas ao expoente de cada termo, para $\vec{\mu}_i = \chi_i \vec{\alpha}_i$,

$$|\Psi(t)\rangle = e^{i(\vec{\mu}_1 + \vec{\mu}_2) \cdot \vec{T}} \Omega^{(3,3)} |\Psi(0)\rangle. \quad (118)$$

Para encontrarmos a invariância da fase geométrica para uma evolução de um átomo de três níveis, resta-nos usar o argumento idêntico à evolução $SU(2)$. Neste caso, $e^{i\chi_1 T_1}e^{i\chi_2 T_2}|\Psi(0)\rangle \sim |\Psi(0)\rangle$, tal que:

$$|\Psi\rangle = e^{i(\vec{\mu}_1 + \vec{\mu}_2) \cdot \vec{T}} \Omega^{(3,3)} |0\rangle \sim e^{i(\vec{\mu}_1 + \vec{\mu}_2) \cdot \vec{T}} \Omega^{(3,3)} e^{i(\chi_1 T_1 + \chi_2 T_2)} |0\rangle = e^{i(\vec{\mu}_1 + \vec{\mu}_2) \cdot \vec{T}} |\Psi\rangle.$$

Novamente, comparando o primeiro e o último termo, a fase geométrica para uma evolução $SU(3)$ arbitrária é invariante sob a transformação:

$$|\Psi\rangle \rightarrow e^{i(\vec{\mu}_1 + \vec{\mu}_2) \cdot \vec{T}} |\Psi\rangle, \quad (119)$$

sendo \vec{T} o vetor-base composto pelos oito geradores da álgebra das matrizes hermitianas de traço nulo, com T_1 e T_2 pertencentes à álgebra de Cartan, $[T_1, T_2] = 0$, enquanto os fatores da combinação que compõe os vetores oito-dimensionais $\vec{\alpha}_1$ e $\vec{\alpha}_2$, que formam $\vec{\mu}_1$ e $\vec{\mu}_2$, são gerados pelas transformadas $\Omega^{(3,3)}T_i\Omega^{(3,3)\dagger} = \vec{\alpha}_i \cdot \vec{T}$, $i = \{1, 2\}$.

Este comportamento é recorrente para a evolução de um estado quântico em qualquer dimensão. A transformada de qualquer gerador é hermitiana, $[\Omega^{(N,N)}T_i\Omega^{(N,N)\dagger}]^\dagger = \Omega^{(N,N)}T_i\Omega^{(N,N)\dagger}$, já que $T_i^\dagger = T_i$, e possui traço nulo, $Tr\{\Omega^{(N,N)}T_i\Omega^{(N,N)\dagger}\} = TrT_i = 0$, logo pode ser escrita como uma combinação linear entre os geradores. A invariância da física concernente à fase geométrica no formalismo de Mukunda-Simon é expressa pela transformação generalizada

$$|\Psi\rangle \rightarrow \exp\left\{i \sum_{i=1}^{N-1} \vec{\mu}_i \cdot \vec{T}\right\} |\Psi\rangle, \quad (120)$$

para os $N - 1$ geradores da álgebra de Cartan das matrizes hermitianas de traço nulo, de um sistema que descreve um átomo N -dimensional, sendo os vetores-base \vec{T} compostos por $N^2 - 1$ componentes, a dimensão da álgebra definida pelo número total de geradores, e $\vec{\mu}_i = \chi_i \vec{\alpha}_i$, ($\vec{\alpha}_i \in \mathcal{R}^{N^2-1}$), com os $\vec{\alpha}_i$ determinados pela transformada

$$\Omega^{(N,N)}T_i\Omega^{(N,N)\dagger} = \vec{\alpha}_i \cdot \vec{T}, \quad i = \{1, \dots, N - 1\}; \quad (121)$$

que, por sua vez, são definidos em função dos parâmetros $\{\xi_j^{(N)}, \gamma_j^{(N)}\}$, $j = \{1, \dots, N - 1\}$, da parametrização da decomposição canônica, sempre escolhendo, convenientemente, a representação do estado característico $|\Psi(0)\rangle = (0, 0, \dots, 0, 1)^T$, para o estado inicial da partícula cuja evolução temporal será descrita.

A física envolvendo a fase geométrica é invariante sob a transformação da eq. (120). Denotando a transformada de um gerador por

$$\mathcal{T}\{T_i\} = \Omega^{(N,N)}T_i\Omega^{(N,N)\dagger}, \quad (122)$$

a lei de comutação dos geradores da subálgebra de Cartan conduz a:

$$[\mathcal{T}\{T_i\}, \mathcal{T}\{T_j\}] = 0 \quad \forall i, j \in \{N - 1\}; \quad (123)$$

donde podemos reescrever a invariância (120) pelo produtório:

$$|\Psi\rangle \rightarrow \prod_{i=1}^{N-1} e^{i\vec{\mu}_i \cdot \vec{T}} |\Psi\rangle. \quad (124)$$

As componentes dos vetores $\vec{\mu}_i$ são todas reais, em geral dependentes do tempo. Apesar dos expoentes serem combinações entre todos geradores, os termos $e^{i\vec{\mu}_i \cdot \vec{T}}$ que comutam entre si representam setores isomorfos ao $U(1)$, *i.e.*, $e^{i\vec{\mu}_i \cdot \vec{T}} \equiv U(1)$. O produtório possui $N - 1$ elementos, de modo que podemos dizer que a fase geométrica é invariante sob transformações $U^{(N-1)}(1)$, uma extensão da invariância de gauge.

Comentário. Se χ_i for infinitesimal $\forall i \in \{N - 1\}$, de modo que a eq. (120) contenha apenas termos até à primeira ordem de χ_i , a invariância seria dada pela transformação

$$|\Psi\rangle \rightarrow \{I_{N \times N} + i \sum_{i=1}^{N-1} \vec{\epsilon}_i \cdot \vec{T}\} |\Psi\rangle; \quad (125)$$

onde chamamos $\vec{\mu}_i = \vec{\epsilon}_i$, um vetor com componentes infinitesimais. Se impuséssemos, além disso, que todos os $\chi_{i \neq k}$ são nulos, com exceção de um χ_k infinitesimal, o somatório acima teria um único elemento. Muitas configurações, associadas às gradezas física do sistema, podem ser pensadas com o objetivo de gerar uma invariância com termos muito mais simples, apenas ajustando as fases do setor T^{N-1} .

5.3 Os análogos do vetor de Bloch em $N^2 - 1$ dimensões

Em dois níveis, a transformada do gerador de Cartan σ_z fornece o vetor de Bloch \hat{n} da eq. (109). Reconhecendo os parâmetros $\xi_1^{(2)}$ e $\gamma_1^{(2)}$ com os ângulos azimutal e polar de $\hat{n}(\theta, \phi)$ da eq. (89), temos

$$\xi_1^{(2)} = -\phi, \quad \gamma_1^{(2)} = \theta/2; \quad (126)$$

onde $\phi \in [0, 2\pi)$ e $\theta/2 \in [0, \frac{\pi}{2})$, contidos em CP^1 . Neste caso,

$$\Omega^{(2,2)} = S_{quo}, \quad (127)$$

e a transformada $\Omega^{(2,2)} \sigma_z \Omega^{(2,2)\dagger} = \hat{n}(\theta, \phi) \cdot \vec{\sigma}$ produz o vetor unitário que aparece na forma geral da fase geométrica exposta na eq. (90), o mesmo que descreve o caminho que determina o ângulo sólido no espaço de estados.

Para uma evolução qualquer de um sistema de N níveis, teremos $N - 1$ transformadas dos geradores diagonais da álgebra de Cartan, de acordo com a eq. (121). Os $\vec{\alpha}_i$ produzidos pelas transformadas são ortonormais (unitários e ortogonais entre si). Ora, tomando o traço dos dois lados da igualdade

$$[\vec{\alpha}_i \cdot \vec{T}] [\vec{\alpha}_j \cdot \vec{T}] = [\Omega^{(N,N)} T_i \Omega^{(N,N)\dagger}] [\Omega^{(N,N)} T_j \Omega^{(N,N)\dagger}],$$

e usando a propriedade cíclica do traço, além da unitariedade de $\Omega^{(N,N)}$, chegamos a

$$\alpha_i^{(a)} \alpha_j^{(b)} \text{Tr}(T_a T_b) = \text{Tr}(T_i T_j);$$

donde, pela ortogonalidade dos geradores da álgebra na base de Gell-Mann exposta na eq. (113),

$$\vec{\alpha}_i \cdot \vec{\alpha}_j = \delta_{ij}. \quad (128)$$

Até então, esta ortonormalidade apontava apenas para um vetor unitário (o vetor de Bloch) para uma evolução $SU(2)$, $\hat{n}(\theta, \phi) \cdot \hat{n}(\theta, \phi) = 1$, correspondendo a eq. (128) quando $i = j$. No caso das evoluções $SU(3)$, as transformadas geram dois vetores, que chamaremos, ao longo do texto, de análogos do vetor de Bloch (ou apenas *vetores de Bloch*), conforme os dois geradores diagonais T_1 e T_2 , tais que, neste caso,

$$\begin{aligned} \vec{\alpha}_1 \cdot \vec{\alpha}_1 &= 1, \\ \vec{\alpha}_2 \cdot \vec{\alpha}_2 &= 1, \\ \vec{\alpha}_1 \cdot \vec{\alpha}_2 &= 0. \end{aligned} \quad (129)$$

Existem, portanto, para um sistema de três níveis, dois vetores unitários que descrevem uma curva no espaço dos parâmetros, que não são independentes, e devem ser, para cada instante da evolução temporal, ortogonais entre si. A visualização da projeção da superfície subentendida pela curva no espaço projetivo é inviável, já que estes vetores evoluem em um espaço de oito dimensões.

Estes vetores oito-dimensionais representam rotações no espaço de 8 dimensões. A rotação mais geral em oito dimensões possui 28 parâmetros. Os vetores $\vec{\alpha}_1$ e $\vec{\alpha}_2$ possuem apenas 4 parâmetros independentes, o que indica que os parâmetros das evoluções temporais não conterão todas as rotações possíveis na representação da matriz densidade pelos vetores de Bloch, considerando a evolução do estado característico $(0, 0, 1)^T$. Conclui-se que nem todas rotações são possíveis no espaço de estado.

Em poucas palavras: para um sistema de N níveis, as transformadas dos geradores diagonais são capazes de gerar $N - 1$ vetores de Bloch que habitam um espaço de $N^2 - 1$ dimensões, – vetores unitários que representam rotações em \mathcal{R}^{N^2-1} , que, ao descreverem suas curvas neste espaço, devem ser todos ortogonais entre si para cada instante da evolução. As rotações possíveis limitam-se aos parâmetros que obedecem a relação (??). No caso de evoluções do estado inicial $(0, \dots, 0, 1)^T$, tais rotações serão restritas a $2(N - 1)$ parâmetros.

Poderíamos tomar, naturalmente, as transformadas dos $N^2 - 1$ geradores da álgebra, gerando, com isso, $N^2 - 1$ vetores ortonormais. Demos uma

atenção especial aos geradores da subálgebra de Cartan pois, além do fato da invariância depender explicitamente dos vetores oriundos da transformada destes geradores, o vetor de Bloch gerado pela transformada de σ_z é responsável por descrever o ângulo sólido no espaço de estado em um sistema de dois níveis, que define a fase geométrica de acordo com a eq. (90), relação que buscamos generalizar para N níveis.

5.4 A estrutura algébrica da fase via fatorização das evoluções infinitesimais

Ao refazer o cálculo para distintos $SU(N)$ pelo método acima, reconhece-se um padrão que permite fatorizar cada *coset* $\Omega^{(m,N)}$, parametrizados por $B^{(m)}$, na forma:

$$\Omega^{(m,N)} = X^{(m,N)} R^{(m,N)} X^{(m,N)\dagger}; \quad m = 2, 3, \dots, N; \quad (130)$$

(ver [29]), sendo $X^{(m,N)}$ uma matriz diagonal de ordem N cujos elementos são fases dadas por

$$X_{k,l}^{(m,N)} = \delta_{k,l} e^{i\xi_k^{(m)}}; \quad (131)$$

com $\xi_i^{(m)} = 0$ se $i \geq m$. Enquanto $R^{(m,N)}$ é uma matriz ortogonal, $R^T R = 1$, com os elementos não nulos parametrizados pelos termos:

$$\begin{aligned} R_{i,j}^{(m,N)} &= \delta_{i,j} + \hat{\gamma}_i^{(m)} \hat{\gamma}_j^{(m)} (\cos \gamma^{(m)} - 1), \quad 1 \leq i, j \leq m-1; \\ R_{i,m}^{(m,N)} &= -R_{m,i}^{(m,N)} = \hat{\gamma}_i^{(m)} \sin \gamma^{(m)}, \quad 1 \leq i \leq m-1; \\ R_{m,m}^{(m,N)} &= \cos \gamma^{(m)}; \\ R_{i,i}^{(m,N)} &= 1, \quad m+1 \leq i \leq N; \end{aligned} \quad (132)$$

onde definimos

$$\hat{\gamma}_i^{(m)} = \frac{\gamma_i^{(m)}}{\gamma^{(m)}}; \quad \gamma^{(m)} = \sqrt{B^\dagger B} = \sqrt{\sum_{i=1}^{m-1} (\hat{\gamma}_i^{(m)})^2}. \quad (133)$$

Utilizando as ferramentas da fatorização em questão, pode-se reescrever, por exemplo, a $\Omega^{(2,2)}$ da eq. (106) na forma:

$$\begin{pmatrix} e^{i\xi_1^{(2)}} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \gamma & \sin \gamma \\ -\sin \gamma & \cos \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\xi_1^{(2)}} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix};$$

do mesmo modo, a $\Omega^{(3,3)}$ da eq. (107) pode ser fatorizada por:

$$\begin{pmatrix} e^{i\xi_1^{(3)}} & 0 & 0 \\ 0 & e^{i\xi_2^{(3)}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 + \frac{\gamma_1^2(\cos\sqrt{\gamma_1^2+\gamma_2^2}-1)}{\gamma_1^2+\gamma_2^2} & \frac{\gamma_1\gamma_2(\cos\sqrt{\gamma_1^2+\gamma_2^2}-1)}{\gamma_1^2+\gamma_2^2} & \frac{\gamma_1\sin\sqrt{\gamma_1^2+\gamma_2^2}}{\sqrt{\gamma_1^2+\gamma_2^2}} \\ \frac{\gamma_1\gamma_2(\cos\sqrt{\gamma_1^2+\gamma_2^2}-1)}{\gamma_1^2+\gamma_2^2} & 1 + \frac{\gamma_2^2(\cos\sqrt{\gamma_1^2+\gamma_2^2}-1)}{\gamma_1^2+\gamma_2^2} & \frac{\gamma_2\sin\sqrt{\gamma_1^2+\gamma_2^2}}{\sqrt{\gamma_1^2+\gamma_2^2}} \\ -\frac{\gamma_1\sin\sqrt{\gamma_1^2+\gamma_2^2}}{\sqrt{\gamma_1^2+\gamma_2^2}} & -\frac{\gamma_2\sin\sqrt{\gamma_1^2+\gamma_2^2}}{\sqrt{\gamma_1^2+\gamma_2^2}} & \cos\sqrt{\gamma_1^2+\gamma_2^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\xi_1^{(3)}} & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i\xi_2^{(3)}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Como podemos perceber, toda a informação sobre as fases se encontra nas matrizes diagonais externas cujos elementos são puramente fases, enquanto os elementos da matriz ortogonal interna são todos reais.

Notamos que a matriz $X^{(m,N)\dagger}$, ao atuar sozinha no estado, não contribui para a γ_g e pode ser eliminada: ao atuar no $|\Psi(0)\rangle$ característico, produz apenas fases,

$$X^{(m,N)\dagger}|\Psi(0)\rangle = e^{if}|\Psi(0)\rangle; \quad (134)$$

o que nos permite dizer que para qualquer grupo $SU(N)$,

$$X^{(m,N)\dagger}|\Psi(0)\rangle \rightarrow |\Psi(0)\rangle. \quad (135)$$

A fatorização nos permite visualizar a estrutura interna da fase de forma geral para um sistema de N níveis. Definindo a matriz $A^{(m,N)}$ como sendo a matriz diagonal de ordem N cujos elementos são $A_{k,l}^{(m,N)} = i\delta_{k,l}\dot{\xi}_k^{(m)}$, para $m = \{2, \dots, N\}$, e $\dot{\xi}_i^{(m)} = 0$ quando $i \geq m$, temos:

$$A^{(m,N)} = X^{-1(m,N)}\partial_t X^{(m,N)}; \quad (136)$$

onde $AX = XA$, $[A, X] = 0$, já que ambas são diagonais. Usando esta propriedade, as inversas $X^{-1} = X^\dagger$ e $R^{-1} = R^T$, encontramos:

$$[\Omega^\dagger\partial_t\Omega]^{(m,N)} = [X\{R^{-1}AR + R^{-1}\partial_t R + A^\dagger\}X^{-1}]^{(m,N)}. \quad (137)$$

Considerando a evolução do estado característico $(0, 0, \dots, 1)^T$, o único setor da decomposição que contribui para a fase geométrica é o setor $SU/U(N-1)$, ou seja, a $\Omega^{(N,N)}$:

$$|\Psi(t)\rangle = \Omega^{(N,N)}(t)|\Psi(0)\rangle. \quad (138)$$

A eq. (137), para $m = N$, refere-se a região interna do integrando do segundo termo da fase geométrica expressa pela eq. (41), tomando a evolução deste estado carcerístico:

$$\langle\Psi|\partial_t|\Psi\rangle = \langle\Psi(0)|\Omega^{(N,N)\dagger}\partial_t\Omega^{(N,N)}|\Psi(0)\rangle; \quad (139)$$

(Obs: na eq. (137), usamos a notação: $\Omega^{(m,N)\dagger} \partial_t \Omega^{(m,N)} = [\Omega^\dagger \partial_t \Omega]^{(m,N)}$).
 Interessamos analisar a estrutura

$$X\{R^{-1}AR + R^{-1}\partial_t R + A^\dagger\}X^{-1}, \quad (140)$$

em função do comportamento das evoluções temporais infinitesimais descritas pela curva $R^{(N,N)}(t)$, e os termos que se conectam à álgebra gerada pelo $R^{(N,N)}$ em cada nível.

Seguindo a álgebra de Lie, a álgebra relacionada à eq. (137), no caso das evoluções infinitesimais, é bem definida. Ora, $\Omega^{(m,N)}$ pertence ao grupo $SU(N)$, logo, para evoluções temporais infinitesimais caracterizadas pela curva

$$\Omega^{(N,N)}(t) = I_{N \times N} + Gt + \varphi(t^2), \quad (141)$$

(onde $\varphi(t^2)$ são elementos de ordens temporais superiores a dois), as matrizes G são anti-hermitianas de traço nulo. Mas se G pertence à álgebra \mathcal{G} , então $\Omega^\dagger \partial_t \Omega$ pertence a mesma álgebra, ou seja, $\Omega^\dagger \partial_t \Omega$ é anti-hermitiano de traço nulo.

Podemos afirmar que o termo interno da eq. (140) pertence à mesma álgebra e é dada por matrizes anti-hermitianas de traço nulo, pois a aplicação de X e X^{-1} nos extremos gerará representações adjuntas da álgebra, que pertencem a mesma. (Se $S \in \mathcal{G}$, então $g^{-1}Sg$ também pertence.) A matriz $A^{(N,N)}$ é anti-hermitiana,

$$A^{(m,N)\dagger} = -A^{(m,N)}, \quad (142)$$

porém não possui traço nulo. Vejamos alguns exemplos: para um sistema de dois níveis, usando a eq. (136),

$$A^{(2,2)} = \begin{pmatrix} i\dot{\xi}_1^{(2)} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix};$$

para um sistema de três níveis, teríamos

$$A^{(3,3)} = \begin{pmatrix} i\dot{\xi}_1^{(3)} & 0 & 0 \\ 0 & i\dot{\xi}_2^{(3)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix};$$

o comportamento para níveis maiores é análogo, donde fica claro que $A^\dagger = -A$. Assim, os dois termos que envolvem $A^{(N,N)}$, somados, são anti-hermitianos, já que

$$[R^{-1}AR + A^\dagger]^\dagger = -[R^{-1}AR + A^\dagger],$$

além disso, o traço da soma é nulo:

$$\text{Tr}(R^{-1}AR + A^\dagger) = 0. \quad (143)$$

A demonstração é imediata: basta usar a propriedade cíclica do traço e a propriedade anti-hermitiana de A :

$$\text{Tr}(R^{-1}AR + A^\dagger) = \text{Tr}(R^{-1}AR) + \text{Tr}A^\dagger = \text{Tr}A + \text{Tr}A^\dagger = \text{Tr}A - \text{Tr}A = 0.$$

Concluimos, portanto, que o termo que sobrou, $R^{-1}\partial_t R$, pertence à álgebra \mathcal{G} , ou seja, $R^{-1}\partial_t R$ é anti-hermitiano de traço nulo, verificando a eq. (137) e o fato de $\Omega^{-1}\partial_t\Omega$ ser anti-hermitiano de traço nulo.

Estes conceitos apontam para um comportamento geral das evoluções infinitesimais descritas pela matriz ortogonal $R^{(N,N)}$. Antes de prosseguirmos, introduziremos agora, na eq. (133), a definição

$$\gamma^{(m)} = \sqrt{B^\dagger B} = \frac{\theta^{(m)}}{2}, \quad \theta^{(m)} \in [0, \pi]; \quad (144)$$

(esta definição conterá uma informação fundamental para as ideias que serão desenvolvidas ao longo do texto. O ângulo θ fará o papel do ângulo azimutal dos objetos geométricos projetados no espaço de estado para a evolução de um sistema arbitrário. Ele deverá estar contido entre $[0, \pi)$ para evitar sobrecontagens de um mesmo estado físico. Tudo isso será discutido mais a frente.) E então, para gerarmos a identidade no operador de evolução temporal do estado no tempo inicial $t=0$,

$$\prod_{j=0}^{N-1} \Omega^{(N-j,N)}(0) \rightarrow I_{N \times N}, \quad (145)$$

devemos impor, de acordo com as equações (132), a condição inicial:

$$\theta^{(m)}(0) = 0. \quad (146)$$

Usando esta condição, temos $R^{(m,N)}(0) = I_{N \times N}$. Trata-se da única condição necessária para fazer cada $\Omega^{(m,N)}(0) \rightarrow I_{N \times N}$, já que as fases das matrizes $X^{(m,N)}$ e $X^{(m,N)\dagger}$ cancelam-se naturalmente. Expandindo, agora, $R^{(N,N)}(t)$ em torno do tempo inicial,

$$R^{(N,N)}(t) = I_{N \times N} + \partial_t R^{(N,N)}(0)t + \varphi(t^2). \quad (147)$$

Cabe-nos calcular a matriz $\partial_t R^{(m,N)}(0)$. Esta matriz pertence à mesma álgebra de $R^{-1}\partial_t R$, como já foi discutido no caso da curva $\Omega^{(N,N)}(t)$. Resumindo: $\partial_t R^{(N,N)}(0)$ deve ser anti-hermitiano de traço nulo. Prosseguindo com os cálculos exatos partindo da fatorização, saberemos quais os geradores da álgebra realmente participam das evoluções infinitesimais.

Em geral, calculando as derivadas pela parametrização de $R^{(m,N)}$ das eq.'s (132), notamos que os únicos termos que gerarão elementos não nulos serão os

$$R_{i,m}^{(m,N)} = -R_{m,i}^{(m,N)} = \hat{\gamma}_i^{(m)} \sin \gamma^{(m)}, \quad 1 \leq i \leq m-1.$$

Renomeamos $\gamma^{(m)} = \frac{\theta}{2}$. Isto implica que os $\gamma_i^{(m)}$, $i \in \{1, \dots, m-1\}$, devem ser expressos em coordenadas esféricas, contidos em uma hipersfera de dimensão $m-1$:

$$\begin{aligned} \gamma_1^{(m)} &= \frac{\theta^{(m)}}{2} \cos \phi_1; \\ \gamma_2^{(m)} &= \frac{\theta^{(m)}}{2} \sin \phi_1 \cos \phi_2; \\ \gamma_3^{(m)} &= \frac{\theta^{(m)}}{2} \sin \phi_1 \sin \phi_2 \cos \phi_3; \\ &\vdots \\ \gamma_{m-2}^{(m)} &= \frac{\theta^{(m)}}{2} \sin \phi_1 \cdots \sin \phi_{m-3} \cos \phi_{m-2}; \\ \gamma_{m-1}^{(m)} &= \frac{\theta^{(m)}}{2} \sin \phi_1 \cdots \sin \phi_{m-3} \sin \phi_{m-2}; \end{aligned}$$

onde $\phi_{m-2} \in [0, 2\pi)$ e todos os outros $\phi_{i < m-1} \in [0, \pi)$. (*Obs:* para um sistema de dois níveis, temos apenas o termo $\gamma_1^{(2)} = \frac{\theta^{(2)}}{2}$, o $\cos \phi_1$ desaparece, pois a parametrização impõe $\sum_{i=1}^{m-1} [\gamma_i^{(m)}]^2 = (\frac{\theta^{(m)}}{2})^2$. Como neste caso só existe um termo $\gamma_1^{(2)}$ no somatório, então $\phi_1 = 0$.)

Observemos, também, que as coordenadas esféricas conservam o número de parâmetros. Para um sistema de três níveis, por exemplo, temos, para $m=3$,

$$\gamma_1^{(3)} = \frac{\theta^{(3)}}{2} \cos \phi_1, \quad \gamma_2^{(3)} = \frac{\theta^{(3)}}{2} \sin \phi_1; \quad \phi_1 \in [0, 2\pi]; \quad (148)$$

se antes tínhamos os dois parâmetros $\gamma_1^{(3)}$ e $\gamma_2^{(3)}$, agora temos $\theta^{(3)}$ e ϕ_1 . Simplificando a notação, chamaremos

$$\gamma_i^{(m)} = \frac{\theta^{(m)}}{2} b_i^{(m)}, \quad i \in \{1, \dots, m-1\}; \quad (149)$$

isto é, deixando o índice m implícito,

$$\vec{\gamma} = \frac{\theta}{2} \vec{b}, \quad \vec{b}^2 = 1. \quad (150)$$

Com isso, encontramos os parâmetros ideais da teoria. Os elementos da eq. (132) não mais possuirão termos no denominador. Esta feliz simplificação será de grande ajuda, pois não precisaremos nos preocupar com eventuais singularidades no espaço de estados, além de inserirmos o parâmetro θ , que possuirá um significado geométrico muito bem definido. Com a eq. (144), os elementos não nulos da derivação podem ser reescritos:

$$R_{i,m}^{(m,N)} = -R_{m,i}^{(m,N)} = b_i^{(m)} \sin \frac{\theta^{(m)}}{2}, \quad 1 \leq i \leq m-1. \quad (151)$$

No nosso caso, interessa-nos apenas $m = N$, tal que, para um sistema de dois níveis, calculando a derivada $\partial_t R^{(2,2)}(0)$, usando as ferramentas acima, encontramos

$$R^{(2,2)}(t) = I_{2 \times 2} + i \frac{\dot{\theta}^{(2)}(0)}{2} \sigma_y t + \varphi(t^2); \quad (152)$$

sendo σ_y a componente y das matrizes de Pauli e $\dot{\theta}^{(2)}(0)$ um parâmetro real. Esta expressão vale para toda evolução $SU(2)$. Percebe-se que $i\sigma_y$ é anti-hermitiano de traço nulo, como havíamos previsto.

Este resultado demonstra que a única matriz que efetivamente contribui nas evoluções infinitesimais de um sistema de dois níveis é a matriz de Pauli σ_y , resultado que sai naturalmente da estrutura interna das evoluções $SU(2)$, sendo, portanto, intrínseco ao fenômeno para qualquer evolução temporal deste tipo. Se as fases forem nulas, por exemplo, a evolução infinitesimal que contém os termos que contribuem para a fase geométrica, desprezando os termos $\varphi(t^2)$, se resume a:

$$|\Psi(t)\rangle = (I_{2 \times 2} + i \frac{\dot{\theta}^{(2)}(0)}{2} \sigma_y t) |\Psi(0)\rangle. \quad (153)$$

Para o cálculo de $R^{(3,3)}$, consideremos a expressão generalizada da $R^{(N,N)}$: após efetuar a derivada dos $R_{i,m}^{(m,N)}$ e aplicar a condição inicial, encontramos a matriz, fazendo $m = N$:

$$\partial_t R_n^{(N;N)}(0) = \frac{i\dot{\theta}^{(N)}(0)}{2} \left(\begin{array}{c|c} O_{N-1 \times N-1} & W \\ \hline W^\dagger & 0 \end{array} \right); \quad (154)$$

onde $O_{N-1 \times N-1}$ é a matriz quadrada nula de ordem $N-1$, e W é um vetor

de $N - 1$ componentes,

$$W = \begin{pmatrix} -ib_1^{(N)}(0) \\ -ib_2^{(N)}(0) \\ \vdots \\ -ib_{N-1}^{(N)}(0) \end{pmatrix}. \quad (155)$$

Usando estes resultados, e definindo a constante $\alpha_i^{(N)} = ib_i^{(N)}(0) \frac{\dot{\theta}^{(N)}(0)}{2}$, a expansão da matriz $R^{(3,3)}$ toma a forma

$$R^{(3,3)}(t) = I_{3 \times 3} + i[\alpha_1^{(3)} \lambda_5 + \alpha_2^{(3)} \lambda_7]t + \varphi(t^2); \quad (156)$$

onde λ_5 e λ_7 são dois geradores da álgebra $SU(3)$, as matrizes de Gell-Mann

$$\lambda_5 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \lambda_7 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}.$$

As únicas matrizes que contribuem para a evolução temporal infinitesimal de um sistema de três níveis são os geradores λ_5 e λ_7 , que nós chamamos, respectivamente, T_4 T_6 na eq. (115). Para o cálculo da fase geométrica com fases $\xi_i^{(3)}$ nulas, a evolução, neste regime, se reduz a:

$$|\Psi(t)\rangle = \{I_{3 \times 3} + i[\alpha_1^{(3)} \lambda_5 + \alpha_2^{(3)} \lambda_7]t\}|\Psi(0)\rangle; \quad (157)$$

sempre descartando os termos com ordem temporal superiores a dois.

Relação análoga à eq. (156) ocorrerá em qualquer dimensão. Para um sistema de dois níveis, temos apenas um gerador, σ_y ; para três níveis, uma combinação entre dois geradores, λ_5 e λ_7 ; para quatro níveis, combinação entre três geradores, e assim por diante. Este fato é uma consequência direta da estrutura da $\partial_t R^{(N,N)}(0)$. Neste sentido, pela definição de $\alpha_i^{(N)}$, concluímos que toda $R_n^{(N,N)}$ é definida pela combinação linear de $N - 1$ geradores do grupo $SU(N)$, explicitamente,

$$R^{(N,N)} = I_{N \times N} + i \left[\sum_{i=1}^{N-1} \alpha_i^{(N)} \lambda_i^{(N)} \right] t + \varphi(t^2); \quad (158)$$

onde $\lambda_i^{(N)}$ são os geradores que devem ser computados na seguinte ordem: o primeiro gerador, $\lambda_1^{(N)}$, é formado pela matriz com os elementos não nulos

$(\lambda_1^{(N)})_{1N} = -i$ e $(\lambda_1^{(N)})_{N1} = i$, que são os extremos da diagonal cruzada. Os outros geradores serão aqueles que fazem $-i$ cair uma linha, e i pular uma coluna para direita, até a última formação possível.

Assim, para $N = 2$, temos um gerador, $\lambda_1^{(2)} = \sigma_y$; para $N = 3$, dois geradores, $\lambda_1^{(3)} = \lambda_5$ e $\lambda_2^{(3)} = \lambda_7$; para $N = 4$, três geradores,

$$\lambda_1^{(4)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_2^{(4)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \lambda_3^{(4)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix}; \quad (159)$$

e assim sucessivamente. A lei de formação dos geradores é visível, e a sua ordem não pode ser violada, em função da constante que acompanha cada gerador na combinação.

A evolução infinitesimal que define a fase geométrica de um sistema de N níveis, com o estado inicial dado pelo estado característico $(0, \dots, 0, 1)^T$, admitindo fases nulas, é descrita por:

$$|\Psi(t)\rangle = \{I_{N \times N} + i[\sum_{i=1}^{N-1} \alpha_i^{(N)} \lambda_i^{(N)}]t\}|\Psi(0)\rangle; \quad (160)$$

com os geradores $\lambda_i^{(N)}$, definidos conforme a lei de formação exposta acima, sendo os únicos que realmente contribuem para a fase geométrica. Desta forma, a fatorização nos permite separar os termos de fase e controlar as evoluções infinitesimais, de acordo com a contribuição (dos geradores possíveis) que desejamos impor à fase geométrica. A estrutura algébrica destas evoluções é muito bem definida, sendo capaz de gerar elementos que são gerais para quaisquer processos adiabáticos (ou que evoluem por uma fase geométrica e outra dinâmica). Nesta seção, tratamos estritamente dos casos deste tipo, pois eliminarmos, desde o início, a contribuição da $\Omega^{(1,N)}$ na evolução temporal dos estados.

5.5 A estrutura algébrica da fase via decomposição de evoluções cíclicas

A fase geométrica para um sistema de N níveis, considerando a evolução temporal do estado característico $(0, 0, \dots, 1)^T$ dada pela eq. (138), é expressa por, segundo o formalismo de Mukunda-Simon:

$$\gamma_g(t) = \text{Arg}\langle\Psi(0)|\Psi(t)\rangle + \int_0^t dt' \langle\Psi(0)|i\Omega^{(N,N)\dagger} \partial_{t'} \Omega^{(N,N)}|\Psi(0)\rangle; \quad (161)$$

Pela parametrização da decomposição, é fácil demonstrar que o primeiro termo, $Arg\langle\Psi(0)|\Psi(t)\rangle$, não contribui. Substituindo $|\Psi(0)\rangle = (0, 0, \dots, 1)^T$ e $|\Psi(t)\rangle = \Omega^{(N,N)}(t)|\Psi(0)\rangle$, encontramos, para um sistema de N níveis:

$$\langle\Psi(0)|\Psi(t)\rangle = \cos \frac{\theta^{(N)}}{2}, \quad (162)$$

sendo $\theta^{(N)}$ definido pela eq. (144), e, conseqüentemente,

$$Arg\langle\Psi(0)|\Psi(t)\rangle = 0. \quad (163)$$

Não há nenhuma inconsistência neste resultado. Ele é uma consequência direta da invariância de gauge. Quando quocientamos o subgrupo de estabilidade, eliminamos a contribuição que continha a fase acumulada na evolução cíclica, isto é, o termo $\Omega^{(1,N)}(\tau)e^{if(\tau)}$, formado pelo setor isomorfo ao $U(1)$ e a fase oriunda da relação $U = e^{if}S$. A invariância de gauge refere-se somente à fase geométrica, não implicando que a fase total seja, de fato, nula.

Admitindo que estado físico evolui ciclicamente, completando uma volta em $t = \tau$, a fase geométrica para uma evolução cíclica, pela decomposição do grupo $SU(N)$ se reduz a:

$$\gamma_g(t) = i \oint_0^\tau dt' \langle\Psi(0)|\Omega^{(N,N)\dagger}\partial_{t'}\Omega^{(N,N)}|\Psi(0)\rangle. \quad (164)$$

Ao assumirmos o estado inicial $|\Psi(0)\rangle = |N\rangle = (0, 0, \dots, 0, 1)^T$, o integrando

$$\langle\Psi(0)|\Omega^{(N,N)\dagger}\partial_{t'}\Omega^{(N,N)}|\Psi(0)\rangle = \langle N|\Omega^{(N,N)\dagger}\partial_{t'}\Omega^{(N,N)}|N\rangle \quad (165)$$

refere-se ao elemento $\Omega^{(N,N)\dagger}\partial_{t'}\Omega^{(N,N)}|_{NN}$ da matriz escrita na base,

$$\begin{aligned} |1\rangle &= (1, 0, 0, \dots, 0)^T, \\ |2\rangle &= (0, 1, 0, \dots, 0)^T, \\ &\vdots \\ |N\rangle &= (0, 0, 0, \dots, 1)^T; \end{aligned}$$

e, conseqüentemente, podemos reescrever a eq. (165) pelo seguinte traço:

$$\Omega^{(N,N)\dagger}\partial_{t'}\Omega^{(N,N)}|_{NN} = Tr\left\{\left(\begin{array}{c|c} O_{N-1\times N-1} & 0 \\ \hline 0^T & 1 \end{array}\right)\Omega^{(N,N)\dagger}\partial_{t'}\Omega^{(N,N)}\right\}; \quad (166)$$

sendo a primeira matriz no interior do traço uma matriz com todos os elementos nulos, com exceção do último. (Interessa-nos fazer aparecer o traço para usar, mais adiante, a ortogonalidade dos geradores na base de Gell-Mann.) A matriz citada pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\left(\begin{array}{c|c} O_{N-1 \times N-1} & 0 \\ \hline 0^T & 1 \end{array} \right) = \frac{1}{N} I_{N \times N} + \beta^q T_q, \quad q = \{1, \dots, N-1\}; \quad (167)$$

onde $\beta^q T_q$ é uma combinação linear entre os geradores diagonais da álgebra de Cartan. (Observemos que o traço unitário original é preservado.) A primeira matriz da eq. (167), composta pela identidade, não contribuirá para a fase. Pela álgebra de Lie, sabemos que $\Omega^{(N,N)\dagger} \partial_{t'} \Omega^{(N,N)}$ é anti-hermitiano de traço nulo. Pela equação (166), a identidade gerará apenas o traço deste termo, que é nulo. Chegamos, por este caminho, à expressão:

$$\gamma_g(\tau) = i\beta^q \oint_0^\tau dt' \text{Tr}[T_q \Omega^{(N,N)\dagger} \partial_{t'} \Omega^{(N,N)}]. \quad (168)$$

Em segundo lugar, a forma geral das evoluções SU(2) dada pela eq. (90) surge do cálculo da fase reparametrizada como uma integral de linha sobre os parâmetros. A fase de Berry é invariante por reparametrização. A evolução por $\Omega^{(N,N)}(t)$ é parametrizada em função dos $2(N-1)$ parâmetros de $B^{(N)}$, isto é, em função de $\{\xi_1^{(N)}, \gamma_1^{(N)}, \xi_2^{(N)}, \gamma_2^{(N)}, \dots, \xi_{N-1}^{(N)}, \gamma_{N-1}^{(N)}\}$. (Ver eq. (105).) Renomeando agora

$$\xi = \{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{[2(N-1)]}\} = \{\xi_1^{(N)}, \gamma_1^{(N)}, \xi_2^{(N)}, \gamma_2^{(N)}, \dots, \xi_{N-1}^{(N)}, \gamma_{N-1}^{(N)}\}, \quad (169)$$

temos

$$|\Psi(t)\rangle = |\Psi(\xi_\mu(t))\rangle, \quad \mu = \{1, 2, \dots, 2(N-1)\}; \quad (170)$$

e assim, reparametrizando a eq. (168) e chamando $\partial_{\xi_\mu} = \partial_\mu$, chegamos a [30]:

$$\gamma_g(\tau) = i\beta^q \oint_{\xi(0)}^{\xi(\tau)} d\xi_\mu \text{Tr}[T_q \Omega^{(N,N)\dagger} \partial_\mu \Omega^{(N,N)}]. \quad (171)$$

Estamos a um passo da generalização desejada, mas antes de aplicarmos o teorema de Stokes nesta expressão, estudaremos o comportamento da evolução arbitrária de um sistema de N níveis, com algumas considerações sobre a topologia do espaço, buscando entender melhor os objetos que são gerados neste espaço, o caráter geométrico dos mesmos, para então trabalharmos em cima da eq. (171) em vista da eq. (90). Apresentaremos uma

interpretação geométrica generalizada da fase de Berry, e veremos que alguns casos recairão em ângulos sólidos mesmo para átomos com mais de dois níveis, resultados que devem ser previstos pela generalização final; e então, estabelecendo a dinâmica do estado quântico como uma teoria desenvolvida dentro do espaço de estado, determinaremos a fase por meio de conceitos da teoria de calibre não-abelianas.

6 Uma interpretação geométrica generalizada da fase no espaço de estados

6.1 Interpretações da fase geométrica em espaços topologicamente triviais

Na abordagem de Mukunda-Simon, a caracterização do espaço cujos pontos representam estados físicos distintos – o espaço topológico – exerce um importante papel no cálculo da fase geométrica, que é definida sobre o espaço projetivo CP^{n-1} . Devemos impor esta propriedade ao espaço para evitarmos sobrecontagens de estados físicos.

Por exemplo, no caso da partícula de spin $\frac{1}{2}$ interagindo com o campo magnético, ao reparametrizarmos a fase geométrica em termos dos parâmetros θ e ϕ (os ângulos que parametrizavam as componentes do campo), assumimos na integração que $\theta \in [0, \pi)$ e $\phi \in [0, 2\pi)$. Estes limites foram naturais, pois estes representam os ângulos azimutal e polar das coordenadas esféricas. Se não tivéssemos imposto estes limites, os parâmetros poderiam ter duas ou mais representações da mesma configuração do campo. Este conceito deve ser levado para um caso geral. (É um conceito que também caracteriza as representações do vetor de Bloch $\hat{n}(\theta, \phi)$.)

Os parâmetros ideais, portanto, devem ser aqueles que eliminam possíveis singularidades e sobrecontagens. Assim como aplicamos o teorema de Green no caso de dois níveis com a ausência de *buracos*, aplicaremos, a um sistema de N níveis, o Teorema de Stokes generalizado. Para um qubit, o espaço projetivo CP^1 coincide com uma superfície em S^2 , sobre a qual qualquer caminho fechado pode ser continuamente deformado a um único ponto. Similarmente, o espaço projetivo $CP^{n-1} = SU(n)/U(n-1)$ é topologicamente trivial,

$$\Pi_1(CP^{n-1}) = 0, \quad (172)$$

ou seja, o seu primeiro grupo de homotopia é nulo. Neste sentido, caminhos fechados no espaço correspondentes às evoluções cíclicas jamais conterão *buracos* em um sistema de N níveis.

Para um nível arbitrário, a evolução do estado característico $(0, 0, \dots, 1)^T$ é dada pela eq. (95). Pela decomposição canônica do grupo,

$$\Omega^{(N,N)} = SU(N)/U(N-1),$$

conforme a eq. (103). Pelo mesmo conceito desenvolvido pela eq. (149), (inserindo, agora, as fases na relação), relacionamos $B^{(N)}$ com um vetor unitário $|b_m\rangle$ de entradas complexas,

$$B^{(N)} = \theta^{(N)}/2 |b_m\rangle, \quad \theta^{(N)} \in [0, \pi); \quad (173)$$

sendo $|b_m\rangle$ um vetor de $N-1$ componentes com $2(N-1)$ parâmetros,

$$|b_m\rangle = (|b_1|e^{i\phi_1}, \dots, |b_{N-1}|e^{i\phi_{N-1}})^T, \quad \langle b_m | b_m \rangle = 1; \quad (174)$$

de forma que o número de parâmetros de $B^{(N)}$ é preservado pela unitariedade de $|b_m\rangle$. O parâmetro $\theta^{(N)}$ é equivalente à raiz do módulo de $B^{(N)}$:

$$\frac{\theta^{(N)}}{2} = \sqrt{B^\dagger B} = \gamma^{(N)}, \quad (175)$$

com os limites de $\theta^{(N)}$ determinados entre $[0, \pi)$ pelo fato de $\cos \frac{\theta^{(N)}}{2}$ representar o módulo de um número complexo, de modo que a $\Omega^{(N,N)}(t)$ toma a seguinte forma:

$$\Omega^{(N,N)} = \left(\begin{array}{c|c} I_{N-1 \times N-1} + (\cos \frac{\theta}{2} - 1) |b_m\rangle \langle b_m| & |b_m\rangle \sin \frac{\theta}{2} \\ \hline -\sin \frac{\theta}{2} \langle b_m| & \cos \frac{\theta}{2} \end{array} \right). \quad (176)$$

De agora em diante, deixaremos implícito o índice N de $\theta^{(N)}$. Substituindo esta expressão na eq. (168), ao calcularmos a fase geométrica em evoluções cíclicas, encontramos:

$$\gamma_g(\tau) = i \oint_0^\tau dt \langle b_m | \dot{b}_m \rangle \sin^2(\theta/2). \quad (177)$$

Utilizando a eq. (174) e reparametrizando a integral em função dos parâmetros ϕ_i (as fases das componentes de $|b_m\rangle$),

$$\gamma_g(\tau) = - \sum_{i=1}^{N-1} \oint_{\phi(0)}^{\phi(\tau)} |b_i|^2 \sin^2(\theta/2) d\phi_i; \quad (178)$$

donde os termos $|b_i|$ do somatório não são independentes entre si. Devido a unitariedade de $|b_m\rangle$, eles formam uma hipercasca esférica de $N-1$ dimensões, com raio unitário:

$$|b_1|^2 + |b_2|^2 + \cdots + |b_{N-1}|^2 = 1, \quad (179)$$

donde podemos escrever um $|b_k|^2$ de nossa escolha em função dos módulos quadráticos restantes,

$$|b_k|^2 = 1 - \sum_{i \neq k}^{N-1} |b_i|^2. \quad (180)$$

Substituindo a eq. (180) na (178), a fase fica definida em termos de $2(N-1)$ parâmetros independentes entre si,

$$\gamma_g(\tau) = - \oint [1 - \sum_{i \neq k}^{N-1} |b_i|^2 \sin^2(\theta/2)] d\phi_k - \oint \sum_{i \neq k}^{N-1} |b_i|^2 \sin^2(\theta/2) d\phi_i. \quad (181)$$

Podemos enxergar estas duas integrais como uma única integral de 1-formas sobre um caminho fechado C no espaço dos $2(N-1)$ parâmetros de uma ecolução arbitrária, *i.e.*, no espaço de estado. Fazendo uso da convenção de Einstein,

$$\gamma_g(\tau) = \oint_C A_\mu dx^\mu, \quad \mu = [1, \cdots, 2(N-1)]; \quad (182)$$

sendo $A_\mu = A_\mu(x^1, \cdots, x^{[2(N-1)]})$, donde definimos x^μ na ordem:

$$\{x^1, \cdots, x^{[2(N-1)]}\} = \{\theta, \phi_k, |b_1|, \phi_1, \cdots, |b_{i \neq k}|, \phi_{i \neq k}, \cdots, |b_{N-1}|, \phi_{N-1}\}; \quad (183)$$

e, conseqüentemente,

$$\begin{aligned} A_\theta &= A_1 = 0; \\ A_{\phi_k} &= A_2 = -[1 - \sum_{i \neq k}^{N-1} |b_i|^2 \sin^2(\theta/2)]; \\ A_{|b_i|} &= A_{2j-1} = 0; \\ A_{\phi_i} &= A_{2j} = -|b_i|^2 \sin^2(\theta/2); \end{aligned} \quad (184)$$

com $j = \{2, \cdots, N-2\}$. (Pela definição da ordem de x^μ dada pela eq. (183), a correspondência fica clara: A_{2j} e A_{2j-1} varrem, respectivamente, as componentes pares e ímpares de A_μ , a partir do A_3 que representa $A_{|b_1|}$, A_4 que representa A_{ϕ_1} , e assim sucessivamente para os $2(N-2)$ elementos restantes, com exceção de $A_1 = A_\theta$ e $A_2 = A_{\phi_k}$.)

Nesta altura, a topologia do espaço é de suma importância para a aplicação do teorema de Stokes, como havíamos mencionado. Pensando no primeiro grupo de homotopia, se o espaço projetivo não fosse topologicamente trivial, existiriam regiões no espaço de estado que invalidariam o método. Quando uma superfície S , que constitui o domínio da integração das 2-formas, sustentada por uma borda ∂S , não pode ser degenerada continuamente a um único ponto, no caminho fechado que contém o *buraco*, o teorema falha. Assumindo, assim, que $\omega = A_\mu dx^\mu$ possui suporte compacto, o que é, em princípio, garantido à eq. (173) – outros casos que invalidam o teorema serão desprezados no momento –, ao aplicarmos o teorema de Stokes (ver Apêndice 2, eq. (267)),

$$\gamma_g = \frac{1}{2} \sum_{i \neq k}^{N-1} \int_S b_i^2 \sin \theta d\phi_i d\theta + \frac{1}{2} \int_S [1 - \sum_{i \neq k}^{N-1} b_i^2] \sin \theta d\phi_k d\theta + 2 \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \sum_{i \neq k}^{N-1} \int_S b_i d\phi_i db_i. \quad (185)$$

Para simplificar a notação, renomeamos $|b_i| = b_i$ e deixamos implícito o produto exterior, isto é, $dx^\mu \wedge dx^\nu = dx^\mu dx^\nu$. Onde se encontra $d\phi_i d\theta$, por exemplo, deve-se ler $d\phi_i \wedge d\theta$, valendo a propriedade antissimétrica

$$d\phi_i d\theta = -d\theta d\phi_i.$$

Para chegarmos a expressão final da fase, notemos que, no teorema de Stokes, os termos com as derivadas cruzadas $\partial_{\phi_l} A_{\phi_m} - \partial_{\phi_m} A_{\phi_l}$, para todo par (ϕ_l, ϕ_m) , não contribuem, pois os A_{ϕ_j} não dependem de nenhum ϕ_i . As derivadas cruzadas envolvendo o par (b_i, b_j) também não contribuem, pois $A_{|b_i|} = 0$ para todo $|b_i|$. No fim, restam apenas as derivadas cruzadas que envolvem os pares (θ, ϕ_i) , (θ, ϕ_k) , que correspondem aos dois primeiros termos, e o par (b_i, ϕ_i) , que representa o último termo. O par (b_i, ϕ_j) com $i \neq j$ não contribui, pois as derivadas $\partial_{b_i} A_{\phi_j}$ são nulas, já que A_{ϕ_j} depende apenas de b_j .

Podemos verificar que a eq. (185) reduz-se ao esperado ângulo sólido no caso de sistemas de dois níveis. Quando $N = 2$, a hipercasca esférica de raio unitário da eq. (179) degenera em um ponto, com um único raio $|b_1|$ constante e unitário, visto que o somatório que define a hipercasca vai até $N - 1$, contendo apenas um único termo, $|b_1|^2$, tal que

$$\sum_{i=1}^{N-1} |b_i|^2 = |b_1|^2 = 1. \quad (186)$$

Com isso, assumindo $k \neq 1$, o segundo termo da eq. (185) não contribui, pois o somatório em $i \neq k$ contém apenas o termo $|b_1|^2 = 1$, donde $1 - \sum_{i \neq k}^{N-1} |b_i|^2 = 0$. O terceiro termo também é nulo, pois $b_1 = |b_1|$ é constante, logo $db_1 = 0$,

cancelando o único termo do terceiro somatório. Portanto, apenas o primeiro termo contribui, saindo deste somatório um único termo que contém $b_1^2 = 1$, de modo que a curva descrita por θ e ϕ_1 no espaço de estados fica contida em uma casca de raio unitário caracterizando o ângulo sólido na primeira integral. Assim, em evoluções $SU(2)$ de átomos de dois níveis,

$$\gamma_g^{SU(2)} = -\frac{1}{2} \int_S \sin \theta d\theta d\phi_1 = -\frac{1}{2} \Omega.$$

(Obs: Se tivéssemos assumido $b_1 = b_k$, o resultado seria o mesmo. O primeiro termo seria nulo, pois todo b_i para $i \neq k$ seria zero. Do mesmo modo o terceiro termo, donde apenas o segundo termo contribuiria, sem o somatório que, sem $|b_1|^2$, é identicamente nulo, sobrando o ângulo sólido.)

Do segundo termo da eq. (185), notamos que sempre existirá um ângulo sólido gerado no espaço de estados definido curva descrita por θ e ϕ_k , para um sistema de N níveis. Separando este termo em dois,

$$\frac{1}{2} \int_S [1 - \sum_{i \neq k}^{N-1} b_i^2] \sin \theta d\phi_k d\theta = -\frac{1}{2} \Omega_k - \frac{1}{2} \sum_{i \neq k}^{N-1} \int_S b_i^2 \sin \theta d\phi_k d\theta; \quad (187)$$

donde definimos o ângulo sólido

$$\Omega_k = \int_S \sin \theta d\theta d\phi_k. \quad (188)$$

Desejamos interpretar geometricamente a fase de uma forma generalizada a partir da eq. (185). O primeiro termo da eq. (187) saiu naturalmente como um ângulo sólido Ω_k . Falta-nos interpretar o primeiro e o terceiro termo da eq. (185), e o segundo termo da eq. (187). Para isso, notemos que ϕ_j é a fase de uma componente complexa do vetor unitário $|b_m\rangle$, enquanto b_j é o módulo da mesma, que pode ser entendido como um raio no espaço de estados, conforme à representação polar de um número complexo $z = r e^{i\varphi}$, usada na parametrização de $|b_m\rangle$ na eq. (174). Definindo o *subespaço de estados* como sendo aquele no qual a curva da evolução é parametrizada pelas coordenadas esféricas (b_i, ϕ_j, θ) , sendo b_i o raio, ϕ_j o ângulo polar e θ o ângulo azimutal, então $b_i^2 \sin \theta d\theta d\phi_j$ é um elemento infinitesimal da área de uma casca esférica de raio b_j , pertencente a este subespaço, que nós denotaremos

$$dS_{ij}^{esf} = b_i^2 \sin \theta d\theta d\phi_j. \quad (189)$$

O segundo termo da eq. (187) é da mesma classe do primeiro da eq. (185), de modo que a interpretação geométrica destes fica definida pelo mesmo conceito: para cada evolução infinitesimal durante um intervalo de tempo dt ,

estes termos projetam sobre S , no subespaço de estados em questão, uma casca esférica de raio $b_j(t)$ que contribuirá com um elemento infinitesimal de área dS_{ij}^{esf} , integrada sobre o domínio para a soma de sucessivas contribuições. Os raios $b_j(t)$ não entram na integração, realizada sobre θ e ϕ_j . No fim, teremos a área sobre uma casca esférica de raio $b_j(\tau)$, $b_j(\tau) < 1$, conforme o domínio definido pela superfície S , que é, em princípio, arbitrária.

Sobrou-nos apenas o terceiro termo da eq. (185). Seguindo o mesmo caminho, isto é, tomando o raio b_i da representação das componentes complexas do vetor $|b_m\rangle$ como o mesmo raio gerado no subespaço, sendo ϕ_j o seu ângulo polar, então $b_i db_i d\phi_j$ é um elemento infinitesimal da área de um disco, que chamaremos

$$dS_{ij}^{disco} = b_i db_i d\phi_j. \quad (190)$$

A contribuição deste termo é multiplicado por um fator de oscilação $\sin^2(\frac{\theta}{2})$, projetando discos sobre S no subespaço que o contém, a serem integrados sobre o domínio, enquanto o fator de oscilação não entra na integração, que se realiza somente sobre os parâmetros b_i e ϕ_i . (Novamente, a dificuldade da integração depende da simetria de S .)

Com isso, podemos expressar a fase geométrica generalizada em termos destes objetos geométricos:

$$\gamma_g = -\frac{1}{2}\Omega_k - \frac{1}{2} \sum_{i \neq k}^{N-1} \int_S dS_{ii}^{esf} - dS_{ik}^{esf} + 4 \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) dS_{ii}^{disco}. \quad (191)$$

É natural pensar a interpretação geométrica generalizada da fase como a soma de pequenas áreas, integradas sobre o domínio do espaço. Precisamente, a cada evolução infinitesimal, projeções de três classes de elementos infinitesimais de áreas:

$$d\gamma_g = -\frac{1}{2}d\Omega_k - \frac{1}{2} \sum_{i \neq k}^{N-1} dS_{ii}^{esf} - dS_{ik}^{esf} + 4 \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) dS_{ii}^{disco}. \quad (192)$$

O primeiro termo, o ângulo sólido, surge da unitariedade de $|b_m\rangle$. O raio unitário, que define o cálculo da área sobre uma casca esférica, possui dimensão de b_i^2 . O ângulo sólido aparece quando a área projetada no subespaço de estados fica contida em uma casca de raio unitário, tal que dS_{ik}^{esf} recaia em $d\Omega_k$. De forma análoga, nas evoluções $SU(2)$ para $k \neq 1$, o ângulo sólido surge exatamente quando o elemento esférico infinitesimal de área dS_{ij}^{esf} degenera em um elemento de ângulo sólido $d\Omega_i$, ($dS_{ii}^{esf} \rightarrow d\Omega_i$), como uma consequência direta do fato da hipercasca de $N - 1$ dimensões degenerar em um ponto, que faz com que o raio b_i de dS_{ii}^{esf} seja unitário.

Pela eq. (192), notamos que um ângulo sólido sempre é produzido acompanhado por $N - 2$ elementos de área dS_{ii}^{esf} , $N - 2$ elementos de dS_{ik}^{esf} e $N - 2$ elementos de dS_{ii}^{disco} , fora o fator de oscilação. Assim, para um átomo de N níveis, cada evolução infinitesimal projeta os seguintes objetos a serem integrados no espaço:

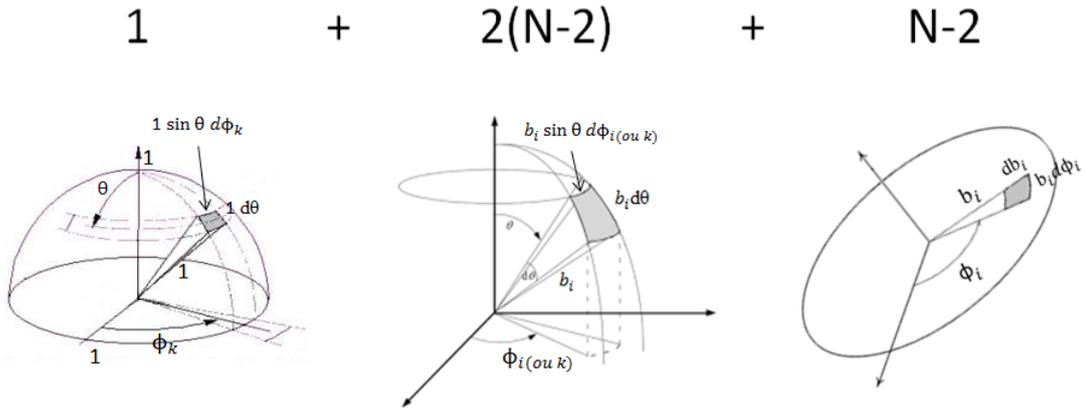


Figura 12: objetos geométricos de um sistema de N níveis

Com esta representação, a generalização fica mais nítida. Quando $N = 2$, não há contribuição dos dois últimos objetos geométricos, restando apenas o primeiro: um único elemento de área infinitesimal que fica restrita a uma casca esférica de raio unitário, conforme a figura abaixo.

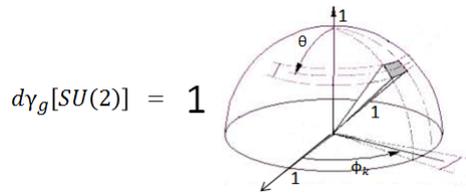


Figura 13: sistema de 2 níveis

Integrada sobre o domínio do espaço, esta projeção resulta no único ângulo sólido que caracteriza a fase geométrica de um qubit. Um sistema de três níveis, por sua vez, projetará quatro objetos geométricos no espaço.

Segundo a interpretação acima, para $N = 3$, a fase projeta um elemento de ângulo sólido, dois de casca esférica e um de disco:

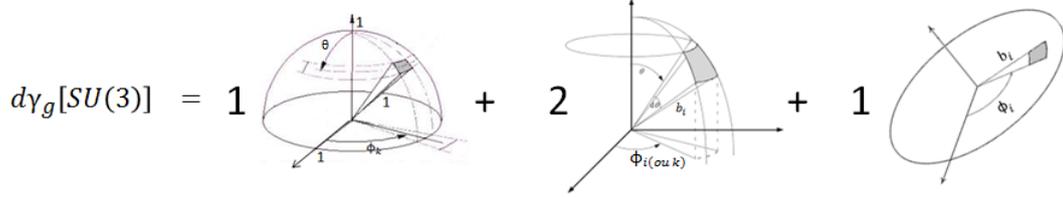


Figura 14: sistema de 3 níveis

Integrados, resultam na área sobre uma casca esférica de raio unitário, duas áreas nas cascas esféricas de raios $b_i(\tau)$ e $b_k(\tau)$, menores do que um, e uma última sobre um disco.

Nesta representação, dividimos a fase geométrica em três objetos: um elemento de ângulo sólido, elementos de área de cascas esféricas e discos. No total, somando $1 + 2(N - 2) + N - 2$, um sistema de N níveis projeta $3N - 5$ objetos no espaço. O segundo objeto, os elementos infinitesimais de casca esférica, contam com os dois casos possíveis: dS_{ii}^{esf} e dS_{ik}^{esf} ; o primeiro projetado no subespaço com ângulo polar ϕ_i e o segundo, com ângulo polar ϕ_k . Esta representação não impede que tais objetos recaiam em ângulos sólidos, trata-se de um caso particular de elementos de casca esférica – bastaria que o raio de um dado subespaço fosse unitário no instante τ . Ela engloba todas as possibilidades, apenas restringe o primeiro objeto a ser sempre um ângulo sólido, por estar *sempre* contido em uma casca de raio unitário.

Observação. Durante a evolução temporal, os $b_j(t)$'s não são livres para assumir quaisquer valores. Pela hipercasca unitária, sabemos que cada $b_j(t)$ dever ser menor ou igual a 1:

$$0 \leq b_j \leq 1, \quad \forall j \in \{1, \dots, N - 1\}; \quad (193)$$

(devido à soma em termos quadráticos b_j^2 , oriunda da unitariedade de $|b_m\rangle$. Se um dos b_j 's for 1, o valor máximo, todos os outros serão nulos.)

Ao retirarmos um b_k de nossa escolha – operação necessária para gerarmos uma base linearmente independente e aplicarmos o teorema de Stokes –, esta condição continua valendo, mas, além dela, os b_i 's restantes que definem os raios nos subespaços, pertencentes ao somatório em $k \neq 1$ da fase geométrica, devem obedecer a uma segunda condição:

$$0 \leq \sum_{i \neq k}^{N-1} b_i^2 \leq 1. \quad (194)$$

Ora, se, em dado instante t_1 , $b_k(t_1) = 0$, o somatório em $i \neq k$ assumirá o valor máximo 1; se, em outro instante t_2 , $b_k(t_2) = 1$, então o somatório assumirá o valor mínimo 0. O raio b_k da reparametrização é extraído da solução geral da fase, mas o seu efeito é sentido pelos outros b_i , que possuem a soma quadrática modulada pelo valor de $b_k(t)$ em cada instante da evolução.

A introdução do vetor unitário $|b_m\rangle$ das evoluções não foi fortuita para a interpretação geométrica. A hipercasca fornece informações precisas sobre os objetos que esperamos encontrar no espaço de estados. Se restringirmos um b_m de nossa escolha a um valor constante, por exemplo, produziremos, em cada ciclo, uma área sempre projetada sobre a casca esférica de raio b_m no subespaço $\{b_m, \phi_j, \theta\}$, conforme a evolução temporal de $\phi_j(t)$ e $\theta(t)$. Deste modo, grandezas físicas associadas aos b_m podem determinar objetos geométricos da fase de forma precisa.

6.2 Redução da fase geométrica a um único ângulo sólido para um sistema de N níveis

Seguindo a decomposição definida pelo vetor unitário da eq. (173), a evolução de um sistema de três níveis com o estado inicial dado pelo estado característico $(0, 0, 1)^T$, $|\Psi(t)\rangle = \Omega^{(3,3)}(t)|\Psi(0)\rangle$, é definida pela relação:

$$\sqrt{\gamma_1^2 + \gamma_2^2} = \frac{\theta}{2}; \quad (195)$$

donde os parâmetros γ_1 e γ_2 podem ser reescritos, portanto, na forma:

$$\gamma_1 = \frac{\theta}{2} \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right), \quad \gamma_2 = \frac{\theta}{2} \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right); \quad (196)$$

sendo α e θ parâmetros reais, tais que $\frac{\alpha}{2} \in [0, 2\pi)$ e $\theta \in [0, \pi)$, de acordo com a parametrização polar, conservando assim o número de parâmetros independentes e evitando recontagens.

Com estas duas equações, o *coset* $\Omega^{(3,3)}$ representado pela eq. (107) pode ser escrito em função dos parâmetros θ e α :

$$\Omega^{(3,3)} = \begin{pmatrix} 1 + \cos^2 \frac{\alpha}{2} (\cos \frac{\theta}{2} - 1) & \frac{1}{2} \sin \alpha (\cos \frac{\theta}{2} - 1) e^{i(\xi_1 - \xi_2)} & \cos \frac{\alpha}{2} \sin \frac{\theta}{2} e^{i\xi_1} \\ \frac{1}{2} \sin \alpha (\cos \frac{\theta}{2} - 1) e^{-i(\xi_1 - \xi_2)} & 1 + \sin^2 \frac{\alpha}{2} (\cos \frac{\theta}{2} - 1) & \sin \frac{\alpha}{2} \sin \frac{\theta}{2} e^{i\xi_2} \\ -\cos \frac{\alpha}{2} \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\xi_1} & -\sin \frac{\alpha}{2} \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\xi_2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \quad (197)$$

Quando impomos, por exemplo, $\alpha = 0$, fazendo com que $\gamma_1 = \frac{\theta}{2}$ e $\gamma_2 = 0$, a matriz $\Omega^{(3,3)}$ toma a forma:

$$\Omega_{\alpha=0}^{(3,3)} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & 0 & \sin \frac{\theta}{2} e^{i\xi_1} \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \frac{\theta}{2} e^{-i\xi_1} & 0 & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \quad (198)$$

Esta matriz nos lembra a *coset* $\Omega^{(2,2)}$ para a evolução de um sistema de dois níveis. Enquanto isso, os análogos do vetor de Bloch em $SU(3)$, expressos pelas eq.'s (116) e (262), são, neste caso:

$$\begin{aligned} \vec{\alpha}_1|_{\alpha=0} &= \frac{1}{2}(2 - \sin^2 \frac{\theta}{2}, -\sqrt{3} \sin^2 \frac{\theta}{2}, 0, 0, -\sin \theta \cos \xi_1, \sin \theta \sin \xi_1, 0, 0), \\ \vec{\alpha}_2|_{\alpha=0} &= \frac{3}{2\sqrt{3}}(-\sin^2 \frac{\theta}{2}, \frac{\sqrt{3}}{3}[3 \cos^2 \frac{\theta}{2} - 1], 0, 0, -\sin \theta \cos \xi_1, \sin \theta \sin \xi_1, 0, 0); \end{aligned} \quad (199)$$

dois vetores cujas componentes não nulas habitam um espaço quadrimensional. (Guardemos este resultado, que nos será útil na próxima seção.) Ao calcularmos a fase geométrica para $|\Psi(t)\rangle_{\alpha=0} = \Omega_{\alpha=0}^{(3,3)}|\Psi(0)\rangle$, sendo $|\Psi(0)\rangle = (0, 0, 1)^T$, encontramos

$$\gamma_g^{SU(3)}(\alpha = 0) = -\frac{1}{2}\Omega_1;$$

com o ângulo sólido projetado no subespaço $\{1, \theta, \xi_1\}$, sendo $\xi_1 = \phi_1$, o ângulo polar.

Se fizermos o mesmo para $\alpha = \pi$, ($\gamma_1 = \frac{\theta}{2}$ e $\gamma_2 = 0$), o *coset* será:

$$\Omega_{\alpha=\pi}^{(3,3)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \frac{\theta}{2} & \sin \frac{\theta}{2} e^{i\xi_2} \\ 0 & -\sin \frac{\theta}{2} e^{-i\xi_2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}; \quad (200)$$

e os análogos do vetor de Bloch em $SU(3)$:

$$\vec{\alpha}_1|_{\alpha=\pi} = \frac{1}{2}(2 - \sin^2 \frac{\theta}{2}, \sqrt{3} \sin^2 \frac{\theta}{2}, 0, 0, 0, 0, \sin \theta \cos \xi_2, -\sin \theta \sin \xi_2),$$

$$\vec{\alpha}_2|_{\alpha=\pi} = \frac{3}{2\sqrt{3}}\left(\sin^2 \frac{\theta}{2}, \frac{\sqrt{3}}{3}\left[3 \cos^2 \frac{\theta}{2} - 1\right], 0, 0, 0, 0, -\sin \theta \cos \xi_2, \sin \theta \sin \xi_2\right); \quad (201)$$

novamente, vetores cujas componentes não nulas habitam um espaço de quatro dimensões.

Desta forma, ao refazermos o cálculo da fase para $|\Psi(t)\rangle_{\alpha=\pi}$, encontramos naturalmente o ângulo sólido, agora projetado no subespaço $\{1, \theta, \xi_2\}$. Este resultado é previsto pela expressão da fase geométrica generalizada da eq. (191). As coordenadas polares da eq. (196) estão relacionadas com o vetor unitário $|b_m\rangle$ da eq. (173), no qual reconhecemos

$$|b_m\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\frac{\alpha}{2})e^{i\xi_1} \\ \sin(\frac{\alpha}{2})e^{i\xi_2} \end{pmatrix}, \quad (202)$$

onde $b_1 = \cos \frac{\alpha}{2}$, $\phi_1 = \xi_1$, $b_2 = \sin \frac{\alpha}{2}$ e $\phi_2 = \xi_2$, conforme a notação usada na seção anterior. Quando determinamos $\alpha = 0$, na verdade atribuímos a b_1 e b_2 os seguintes valores:

$$b_1 = 1, \quad b_2 = 0; \quad (203)$$

com isso, tomando $k = 1$, dS_{22}^{esf} e dS_{21}^{esf} vão a zero, assim como dS_{22}^{disco} , restando apenas o primeiro termo $\gamma_g = -\frac{1}{2}\Omega_1$. (O mesmo ocorre se tomarmos $k = 2$. Neste caso, $b_k = 0$, donde $dS_{1k}^{esf} \rightarrow d\Omega_k$, cancelando com o primeiro termo; $dS_{11}^{disco} \rightarrow 0$, já que $b_1 = 1$, isto é, $db_1 = 0$, restando apenas o elemento infinitesimal $dS_{11}^{esf} \rightarrow d\Omega_1$, donde o resultado final é o mesmo: $\gamma_g = -\frac{1}{2}\Omega_1$.)

Por sua vez, se $\alpha = \pi$, temos

$$b_1 = 0, \quad b_2 = 1, \quad (204)$$

e, pelo mesmos motivos do caso anterior, a expressão generalizada da fase obtém o mesmo resultado, $\gamma_g = -\frac{1}{2}\Omega_2$, como não poderia ser diferente.

Este procedimento indica um método muito simples para fazer com que a fase geométrica seja dada por um único ângulo sólido, em um sistema de nível arbitrário. O método é estritamente análogo ao sistema de três níveis, basta termos em mente a eq. (191). Enfim, sempre que quisermos restringir a fase geométrica a um ângulo sólido projetado no subespaço $\{b_j, \theta, \phi_j\}$, $j \neq k$, devemos impor $b_j = 1$. Assim, pela hipercasca unitária, todos os outros b_i , $i \neq j$, serão nulos. O elemento de área do disco será nulo em todo caso, pois mesmo para b_j teremos $db_j = 0$, já que $b_j = 1$. Os outros serão naturalmente nulos, pois $b_{i \neq j} = 0$ devido a eq. (179). O somatório em $i \neq k$ só terá dois termos diferentes de zero, dS_{jj}^{esf} e dS_{jk}^{esf} , que recaem respectivamente em $d\Omega_j$

e $d\Omega_k$, com o segundo cancelando o primeiro termo da eq. (191), restando apenas $\gamma_g = -\frac{1}{2}\Omega_j$.

No caso de um sistema de três níveis, as possibilidades são dadas pelas eq.'s (203) e (204), que representam, respectivamente, os vetores unitários:

$$|b_m^{(a)}\rangle = \begin{pmatrix} e^{i\phi_1} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |b_m^{(b)}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ e^{i\phi_2} \end{pmatrix}; \quad (205)$$

o primeiro projetando um ângulo sólido no subespaço $\{b_1, \theta, \phi_1\}$, $b_1 = 1$, a única projeção da fase no espaço de estados neste caso, e o segundo, no subespaço $\{b_2, \theta, \phi_2\}$, $b_2 = 1$. Os valores de ϕ_1 e ϕ_2 são arbitrários.

Pelo mesmo raciocínio, as possibilidades para restringir a fase a um único ângulo sólido, por este método, para um sistema de quatro níveis são:

$$\begin{aligned} i) & b_1 = 1, b_2 = 0, b_3 = 0; \\ ii) & b_1 = 0, b_2 = 1, b_3 = 0; \\ iii) & b_1 = 0, b_2 = 0, b_3 = 1; \end{aligned} \quad (206)$$

que representam, respectivamente,

$$|b_m^{(a)}\rangle = \begin{pmatrix} e^{i\phi_1} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad |b_m^{(b)}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ e^{i\phi_2} \\ 0 \end{pmatrix}; \quad |b_m^{(c)}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ e^{i\phi_3} \end{pmatrix}. \quad (207)$$

Em cada caso, ϕ_1 , ϕ_2 e ϕ_3 são livres para assumir quaisquer valores. O vetor unitário $|b_m^{(a)}\rangle$, por exemplo, produzirá uma única projeção no espaço de estados de dimensão 8, um único ângulo sólido, contido no subespaço $\{b_1, \theta, \phi_1\}$, onde $b_1 = 1$.

A segunda parte do método consiste em reduzir a fase a um único ângulo sólido projetado no subespaço $\{1, \theta, \phi_k\}$. Neste caso, b_k não faz parte do espaço de estado, e θ e ϕ_k compõem um subespaço que possui raio sempre unitário, oriundo da unitariedade de $|b_m\rangle$, (diferente dos outros casos, em que o raios eram parâmetros independentes). Este subespaço é capaz de produzir apenas ângulos sólidos, representado pelo primeiro termo da eq. (191).

Para reduzir a fase geométrica, em qualquer nível, a $\gamma_g = -\frac{1}{2}\Omega_k$, o procedimento mais imediato é tomar $b_k = 1$ e os outros $b_i = 0$ quando $i \neq k$,

assim como fizemos no caso de três níveis. Ora, ao tomarmos $b_{i \neq k} = 0$, todas as contribuições dos elementos de área dos somatórios em $i \neq k$ são automaticamente canceladas, porém os vetores unitários serão do mesmo tipo da eq. (206), apenas assumindo agora $j = k$. Para encontrar outras possibilidades, a equação mais geral que reduz a fase geométrica a um único ângulo sólido no subespaço $\{1, \theta, \phi_k\}$ é:

$$\sum_{i \neq k}^{N-1} dS_{ii}^{esf} - dS_{ik}^{esf} + 4 \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) dS_{ii}^{disco} = 0; \quad (208)$$

podendo $b_{i \neq k}$ assumir quaisquer valores de acordo com as condições (193) e (194), sem fixar $b_k = 1$.

Esta equação abre um leque de combinações possíveis entre os parâmetros $\{b_i, \phi_i\}$ da reparametrização unitária que corresponderão a $\gamma_g = -\frac{1}{2}\Omega_k$. Por exemplo, para um sistema de dois níveis, admitindo que os raios b_1 e b_2 sejam constantes, de modo que $db_i = 0$ e $dS_{ii}^{disco} \rightarrow 0$, e tomando $k = 2$, a eq. (208) fornece:

$$b_1^2 \sin \theta d\theta d\phi_1 - b_1^2 \sin \theta d\theta d\phi_2 = 0. \quad (209)$$

Para isto, basta tomar $\phi_1 = \phi_2 = \phi$. Concluimos que os vetores unitários

$$|b_m\rangle = \begin{pmatrix} a e^{i\phi} \\ b e^{i\phi} \end{pmatrix}, \quad a^2 + b^2 = 1, \quad (a, b = \text{constantes}), \quad (210)$$

também produzem um único ângulo sólido no subespaço $\{1, \theta, \phi_k\}$, sendo $\phi_k = \phi_2 = \phi$. No caso particular em que $a = b = \frac{\sqrt{2}}{2}$, temos

$$|b_m\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} e^{i\phi} \\ e^{i\phi} \end{pmatrix}.$$

Este vetor é equivalente a fazer $\alpha = \frac{\pi}{2}$ nas coordenadas polares da eq. (196). O *coset* resultante neste caso é:

$$\Omega_{\alpha=\frac{\pi}{2}}^{(3,3)} = \begin{pmatrix} \cos^2 \frac{\theta}{4} & -\sin^2 \frac{\theta}{4} & \frac{\sqrt{2}}{2} \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \\ -\sin^2 \frac{\theta}{4} & \cos^2 \frac{\theta}{4} & \frac{\sqrt{2}}{2} \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \quad (211)$$

Notamos que o resultado não é trivial como nos casos anteriores, que lembravam de uma certa maneira a evolução $SU(2)$. Podemos fazer uma rápida verificação do método, calculando explicitamente a fase pelo caminho inverso. A evolução temporal do estado característico $|\Psi(0)\rangle = (0, 0, 1)^T$, neste caso, é dada por $|\Psi(t)\rangle_{\alpha=\frac{\pi}{2}} = \Omega_{\alpha=\frac{\pi}{2}}^{(3,3)}|\Psi(0)\rangle$:

$$|\Psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \\ \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}; \quad (212)$$

donde encontramos $A_\phi = \langle \Psi | \partial_\phi | \Psi \rangle = i \sin^2 \frac{\theta}{2}$ e $A_\theta = \langle \Psi | \partial_\theta | \Psi \rangle = 0$. Daí, aplicando o teorema de Green sobre estes dois elementos, com a orientação das superfícies convencionada anteriormente pelo teorema de Stokes (no Apêndice 2) – o teorema de Green nada mais é do que um caso particular do Stokes generalizado –, temos

$$\gamma_g = i \oint A_\phi d\phi + A_\theta d\theta = \int_S (\partial_\phi A_\theta - \partial_\theta A_\phi) d\phi d\theta = \frac{1}{2} \int_S \sin \theta d\phi d\theta;$$

tal que, usando a propriedade antissimétrica $d\phi d\theta = -d\theta d\phi$,

$$\gamma_g = -\frac{1}{2} \int_S \sin \theta d\theta d\phi = -\frac{1}{2} \Omega_k;$$

como havia sido previsto pela eq. (208), verificando a validez do método para gerar novas $|b_m\rangle$'s, isto é, novos *cosets* $\Omega^{(3,3)}$ responsáveis pela evolução temporal do estado, capazes de reduzir a fase geométrica a um único ângulo sólido no subespaço $\{1, \theta, \phi_k\}$.

Retornando ao sistema de quatro níveis, para os raios b_1, b_2 e b_3 constantes, assumindo $k = 3$, a eq. (208) fornece a equação:

$$(b_1^2 d\phi_1 + b_2^2 d\phi_2 - b_1^2 d\phi_3 - b_2^2 d\phi_3) \sin \theta d\theta = 0. \quad (213)$$

De imediato, a equação será satisfeita quando $\phi_1 = \phi_2 = \phi_3 = \phi$, que corresponde ao vetor unitário

$$|b_m^{(d)}\rangle = \begin{pmatrix} a e^{i\phi} \\ b e^{i\phi} \\ c e^{i\phi} \end{pmatrix}, \quad a^2 + b^2 + c^2 = 1, \quad (a, b, c = \text{constantes}). \quad (214)$$

(Este comportamento é recorrente. Para um átomo de N níveis com raios constantes, o vetor unitário que possui as fases $\phi_i = \phi_j, \forall i, j \in \{1, \dots, N - 1\}$, será sempre um dos casos que gera um único ângulo sólido no subespaço $\{1, \theta, \phi_k\}$.)

A eq. (213) fornece outras soluções imediatas: se tomarmos, por exemplo, $b_1 = 0$ e $\phi_2 = \phi_3$, a equação será novamente satisfeita, agora com ϕ_1 não necessariamente igual a ϕ_2 e ϕ_3 . Do mesmo modo para $b_2 = 0$ e $\phi_1 = \phi_3$, com ϕ_2 podendo assumir quaisquer valores. Os vetores unitários gerados nestes casos são, respectivamente:

$$|b_m^{(e)}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ ae^{i\phi} \\ be^{i\phi} \end{pmatrix}; \quad |b_m^{(f)}\rangle = \begin{pmatrix} ae^{i\phi} \\ 0 \\ be^{i\phi} \end{pmatrix}, \quad a^2 + b^2 = 1, \quad (215)$$

que são distintos de $|b_m^{(d)}\rangle$ devido a arbitrariedade de uma das fases em cada caso.

Aplicamos o método da eq. (208) apenas para o caso de raios constantes e conseguimos gerar novos vetores unitários, (além dos triviais obtidos pela condição $b_{i \neq k} = 0$), que definirão a parametrização da evolução temporal do estado, formando uma classe de novas matrizes $\Omega^{(N,N)}$ capazes de produzir estados que reduzem a fase geométrica a um único ângulo sólido. Quanto maior for o número de níveis, maiores serão as combinações possíveis entre os valores dos raios que irão satisfazer a equação. No fim, a utilidade do método consiste em reduzir um problema que habita um espaço de $2(N - 1)$ dimensões a uma única projeção em um espaço tridimensional.

Se não tivéssemos admitido raios constantes, deveríamos considerar a contribuição das integrações dos elementos $dS_{ii}^{disco} = b_i db_i d\phi_i$, que computam exatamente a área determinada pela variação dos raios, tomando a fase ϕ_i como o ângulo polar do subespaço. Os limites de integração de cada integral definida podem depender de funções dos $2(N - 1)$ parâmetros do espaço de estado, – funções $f[\theta, b_{i \neq k}, \phi_i]$ que são definidas pela curvatura da superfície do domínio de integração.

Observação. Poderíamos reduzir a representação da fase geométrica a um único ângulo sólido, a menos de um fator, pelo seguinte procedimento: tomando, novamente, os raios b_i constantes, o último termo da eq. (191) não contribui, enquanto os elementos de casca esférica podem sofrer a seguinte operação:

$$\int_S dS_{ii}^{esf} \longrightarrow b_i^2 \int_S \sin \theta d\theta d\phi_i = b_i^2 \Omega_i, \quad (216)$$

(operação válida mesmo para raios não constantes), de acordo com as definições das eq.'s (188) e (189).

A partir desta operação, podemos reescrever a fase generalizada em termos dos objetos geométricos da seguinte forma:

$$\gamma_g = -\frac{1}{2}\Omega_k - \frac{1}{2} \sum_{i \neq k} b_i^2 (\Omega_i + \Omega_k), \quad (217)$$

Esta expressão permite encontrar a fase geométrica da interação de uma partícula de spin s com um campo magnético, dada pela eq. (85). Podemos reescrever esta equação na forma

$$\gamma_g = (N - 1) \left(-\frac{1}{2}\Omega\right). \quad (218)$$

A explicação é imediata: um sistema que representa uma partícula de spin $\frac{1}{2}$ possui duas dimensões; que representa uma partícula de spin 1, três dimensões, e assim sucessivamente, sempre correspondendo à degenerescência $2s + 1$, devido aos valores possíveis das componentes z do spin. Explicitamente, $s = \frac{N-1}{2}$.

Para fazer a eq. (217) recair na eq. (218), as fases devem obedecer a relação:

$$\begin{aligned} d\phi_1 &= c_1 d\phi, \\ d\phi_2 &= c_2 d\phi, \\ &\vdots \\ d\phi_{N-1} &= c_{N-1} d\phi, \end{aligned} \quad (219)$$

sendo ϕ um ângulo polar qualquer. E então, obedecendo a esta relação, sendo Ω uma representação de ângulo sólido com ângulo polar ϕ , a fase geométrica nestas condições será expressa por:

$$\gamma_g = \left[1 + \sum_{i \neq k}^{N-1} b_i^2 (c_i + c_k)\right] \left(-\frac{1}{2}\Omega\right). \quad (220)$$

A última condição que falta para que esta fase seja dada pela eq. (218) é:

$$\sum_{i \neq k}^{N-1} b_i^2 (c_i + c_k) = N - 2. \quad (221)$$

Deste modo, a generalização da fase em função do spin da partícula pode ser vista como um caso particular da eq. (217), na qual as $3N - 5$ projeções no espaço de estado podem ser representadas por um único ângulo sólido no subespaço $\{1, \theta, \phi\}$, a menos de um fator $N - 1$, coincidentemente, o número de geradores da álgebra de Cartan.

7 A generalização da fase geométrica para um sistema de N níveis

7.1 As evoluções cíclicas e o tensor densidade de campo não-abeliano

Com todas essas considerações, retornemos, enfim, a eq. (171). Nosso objetivo é seguir os passos da eq. (90). Nesta equação, a fase é expressa em função do produto escalar do vetor de Bloch com um vetor que é o resultado do produto vetorial $\partial_\theta \hat{n} \times \partial_\phi \hat{n}$. Em dois níveis, os vetores de Bloch $\hat{n} = \hat{n}(\theta, \phi)$ são tridimensionais. Em três níveis, os análogos do vetor de Bloch serão oito-dimensionais. A generalização parece ser determinada pela solução do seguinte problema: o que faria o papel do *produto vetorial* em oito dimensões? Ou, para um átomo de N níveis, em $N^2 - 1$ dimensões? Qual o papel das rotações representadas pelos $\vec{\alpha}_i$?

A integral de superfície da eq. (90) surge quando aplicamos o teorema de Green à 1-forma $A_\theta d\theta + A_\phi d\phi$, sendo θ e ϕ os dois parâmetros suficientes para parametrizar evoluções $SU(2)/U(1)$. No caso geral, as evoluções $SU(N)/U(N-1)$ de um átomo de N níveis serão parametrizadas por $2(N-1)$ parâmetros, em virtude da decomposição. A eq. (171) pode ser entendida como a integral de 1-formas sobre estes parâmetros, indicados pelos $\xi_\mu^{(N)}$ da eq. (169), onde $\mu \in \{1, \dots, 2(N-1)\}$.

O termo no interior do traço da eq. (171) pertence à álgebra de Lie. Sendo $\Omega^{(N,N)} \in SU(N)$, tal que $\Omega^{(N,N)} \partial_t \Omega^{(N,N)}$ é anti-hermitiano de traço nulo, então $i\Omega^{(N,N)} \partial_t \Omega^{(N,N)}$ é hermitiano de traço nulo, donde podemos escrevê-lo como uma combinação linear entre os geradores da álgebra $SU(N)$,

$$i\Omega^{-1} \partial_\mu \Omega = C_\mu^A T_A, \quad A \in \{1, \dots, N^2 - 1\}. \quad (222)$$

São estes C_μ^A as funções das 1-formas a serem integradas por uma caminho fechado Γ , durante a evolução cíclica no intervalo $[0, \tau]$. Os geradores T_q da eq. (171) são os geradores diagonais da álgebra de Cartan. Na representação fundamental, os elementos da diagonal de T_q são

$$\frac{1}{\sqrt{2q(q+1)N}} (1, \dots, 1, -q, 0, \dots, 0). \quad (223)$$

Ao substituírmos a eq. (222) na eq. (171), usando a ortogonalidade do traço dos geradores, $Tr\{T_q T_A\} = \frac{1}{2N} \delta_{qA}$, chegamos a

$$\gamma_g(\tau) = \frac{\beta^q}{2N} \oint_\Gamma d\xi_\mu C_\mu^q; \quad (224)$$

lembrando que $q \in \{1, \dots, N-1\}$ e $\mu \in \{1, \dots, 2(N-1)\}$.

Aplicando o teorema de Stokes, (ver eq. (268) do Apêndice 2), chamando o produto exterior $d\xi_\mu \wedge d\xi_\nu = dS_{\mu\nu}$, sem fazer distinção entre índices superiores e inferiores, e definindo $\gamma_g = \beta^q \Phi_q$, temos

$$\Phi_q(\tau) = \frac{1}{4N} \int_{S(\Gamma)} dS_{\mu\nu} (\partial_\mu C_\nu^q - \partial_\nu C_\mu^q). \quad (225)$$

Aplicaremos, agora, algumas ferramentas advindas das teorias de Yang-Mills. Quando desejamos impor simetria local por transformações do tipo $\Psi' \rightarrow g\Psi$ a um sistema, devemos introduzir a derivada covariante

$$D_\mu = \partial_\mu - iB_\mu(x). \quad (226)$$

Sendo Ψ funções que representam duas ou mais partículas, os campos $B_\mu(x)$ serão matrizes. Assumindo que $g \in SU(N)$ e que B_μ pertence a álgebra de Lie, isto é, $B_\mu = B_\mu^A T_A$, onde $A = \{1, \dots, N^2 - 1\}$ são os índices de cor e T_A , os geradores da álgebra, tal que

$$[B_\mu, B_\nu] = i\bar{f}_{ABC} B_\mu^A B_\nu^B T_C,$$

calculando o comutador das derivadas covariantes definido pelo tensor densidade de campo $F_{\mu\nu}$ não abeliano

$$i[D_\mu, D_\nu] = F_{\mu\nu}(B) = F_{\mu\nu}^A(B) T_A, \quad (227)$$

encontramos,:

$$F_{\mu\nu}^A(B) = \partial_\mu B_\nu^A - \partial_\nu B_\mu^A + \bar{f}_{ABC} B_\mu^B B_\nu^C. \quad (228)$$

(Obs: na representação fundamental, as constantes de estrutura carregam um fator $\frac{1}{\sqrt{N}}$, que nós não havíamos considerado anteriormente, em outras palavras, $\bar{f}_{ABC} = \frac{1}{\sqrt{N}} f_{ABC}$.)

Nosso intuito, em princípio, é usar os conceitos como *ferramentas* úteis para eliminar de $\Phi_q(\tau)$ termos que não contribuem para a fase geométrica. Podemos somar e subtrair um termo $\bar{f}_{qBC} \mathcal{C}_\mu^B \mathcal{C}_\nu^C$ no integrando da eq. (225), deste modo:

$$\Phi_q(\tau) = \frac{1}{4N} \int_{S(\Gamma)} dS_{\mu\nu} (F_{\mu\nu}^q(\mathcal{C}) - H_{\mu\nu}^q(\mathcal{C})), \quad (229)$$

onde chamamos

$$H_{\mu\nu}^q(\mathcal{C}) = \bar{f}_{qBC} \mathcal{C}_\mu^B \mathcal{C}_\nu^C. \quad (230)$$

Mas o primeiro termo do integrando é nulo. A eq. (222) indica que $\mathcal{C}_\mu = \mathcal{C}_\mu^A T_A$ é um puro calibre para o tensor densidade de campo não abeliano:

$$F_{\mu\nu}^q(\mathcal{C}) = 0. \quad (231)$$

Esta propriedade não é particular de caso específico, mas determinada apenas pela estrutura da eq. (227). (Ver a demonstração no apêndice 3.) Com isso, reduzimos a fase geométrica aos únicos termos que realmente contribuem [30]:

$$\Phi_q(\tau) = -\frac{1}{4N} \int_{S(\Gamma)} dS_{\mu\nu} H_{\mu\nu}^q(\mathcal{C}), \quad (232)$$

onde q é um índice de cor limitado entre $\{1, \dots, N-1\}$, e $H_{\mu\nu}^q(\mathcal{C})$ é definido pela eq. (230), sendo f^{qBC} as constantes de estrutura da álgebra cuja dimensão dos geradores é determinada pelo nível do sistema.

7.2 Representação da fase geométrica por monopolos das teorias de Yang-Mills

O objetivo é generalizar a fase geométrica descrita pelo vetores de Bloch na eq. (90). O integrando $\hat{n} \cdot \partial_\theta \hat{n} \times \partial_\phi \hat{n}$ possui a mesma estrutura da contribuição de monopolo da configuração magnética descrita pelo tensor densidade de campo não-abeliano das teorias de Yang-Mills: $F_{ij} = F_{ij}^1 T_1 + F_{ij}^2 T_2 + F_{ij}^3 T_3$. Nesta teoria, a contribuição de monopolo é expressa por uma estrutura do tipo:

$$\hat{n} \cdot F_{ij} = -\frac{1}{g} \hat{n} \cdot \partial_i \hat{n} \times \partial_j \hat{n}. \quad (233)$$

O monopolo magnético oriundo deste tensor é denominado monopolo de t'Hooft. Desejamos escrever a fase para um sistema de N níveis como uma representação que generalize esta estrutura.

Os β^q que compõem a fase geométrica, $\gamma_g = \beta^q \phi_q$, advêm da eq. (167). Isolando $\beta^q T_q$ desta equação, e usando a representação fundamental dos geradores diagonais dada pela eq. (223) para $q = N-1$, encontramos:

$$\beta^q T_q = \begin{pmatrix} -\frac{1}{N} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -\frac{1}{N} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 - \frac{1}{N} \end{pmatrix} = -\sqrt{2(N-1)} T_{N-1}. \quad (234)$$

(Para chegar a esta relação, basta por em evidência $-1/N$ na matriz.) Os vetores $\vec{\beta}|^q = (\beta^1, \beta^2, \dots, \beta^{N-1})$ são uma $(N-1)$ -tupla. Multiplicando a equação acima dos dois lados por um gerador da álgebra T_p , tomando o traço e usando $Tr\{TqT_p\} = \frac{1}{2N}\delta_{qp}$,

$$\beta^q = -\sqrt{2(N-1)}\delta_{q(N-1)}, \quad (235)$$

ou seja, o único elemento não nulo é β^{N-1} , donde a $(N-1)$ -tupla, que denotaremos $\vec{\beta}_N \equiv \vec{\beta}|^q$, é:

$$\vec{\beta}_N = (0, \dots, 0, -\sqrt{2(N-1)}). \quad (236)$$

Podemos associar esta $(N-1)$ -tupla com os pesos na representação fundamental. Os pesos são os autovalores dos geradores da álgebra de Cartan. Cada gerador possui N pesos, isto é, os N elementos da diagonal. Representando os N pesos por uma $(N-1)$ -tupla \vec{w}_i , dada por

$$\vec{w}_i = (T_1|_{ii}, T_2|_{ii}, \dots, T_{N-1}|_{ii}), \quad i = \{1, \dots, N\} \quad (237)$$

então podemos relacionar as duas $(N-1)$ -tuplas, tal que

$$\vec{\beta}_N = 2N\vec{w}_N. \quad (238)$$

Todos os elementos da \vec{w}_N na representação fundamental são nulos, com exceção do último, que apenas difere do β^{N-1} por um fator $2N$. Em razão desta relação, chamaremos as componentes da $(N-1)$ -tupla $\vec{\beta}_N$ de *pesos magnéticos*.

Para prosseguir, necessitaremos de algumas definições. A primeira refere-se aos análogos do vetor de Bloch, produzidos pelas transformadas dos geradores diagonais, $\Omega T_A \Omega^{-1} = \alpha_A^i T_i$, onde $i = \{1, \dots, N^2 - 1\}$ e $A = \{1, \dots, N-1\}$. Denotaremos a matriz composta pela combinação linear $\alpha_A^i T_i$ simplesmente por u_A , isto é,

$$\Omega T_A \Omega^{-1} = u_A; \quad A = \{1, \dots, N-1\}. \quad (239)$$

Usaremos também o produto natural entre os elementos da álgebra de Lie X e Y , dado por:

$$X \wedge Y = -i[X, Y]. \quad (240)$$

Desta maneira, imediatamente encontramos, usando a relação de comutação entre os geradores $[T_A, T_B] = i\bar{f}_{ABC} T_C$,

$$u_A \wedge u_B = \bar{f}_{ABC} u_C. \quad (241)$$

Além disso, devemos considerar o produto interno definido pela forma de Killing:

$$\langle X, Y \rangle = \text{Tr}\{Ad(X)Ad(Y)\}, \quad (242)$$

donde

$$\langle u_A, u_B \rangle = \delta_{AB}, \quad (243)$$

visto que $\langle u_A, u_B \rangle = \langle T_A, T_B \rangle = \text{Tr}\{M_A M_B\} = \delta_{AB}$. Sabemos que u_A é uma matriz composta por uma combinação linear entre os geradores, logo $\partial_\mu u_A$ também é, com os fatores da combinação sendo derivados. Podemos, em todo caso, escrever

$$\partial_\mu u_A = X^{A'} u_{A'}, \quad (244)$$

no qual reconhecemos os fatores $X^{A'}$ como os fatores derivados descontando os próprios fatores de u_A . De uma forma geral, fazendo o produto interno entre $\partial_\mu u_B$ e outro u_A , e usando a ortogonalidade da forma de Killing da eq. (243):

$$\langle u_A, \partial_\mu u_B \rangle = X^B \langle u_A, u_B \rangle = X^B \delta_{AB} = X^A. \quad (245)$$

Substituindo este resultado na equação acima,

$$\partial_\mu u_A = \langle u_{A'}, \partial_\mu u_A \rangle u_{A'}. \quad (246)$$

A matemática que desenvolveremos agora é a mesma que aparece na análise de vórtices de centro e monopolos nos modelos de Yang-Mills-Higgs, (ver [31] e referências). Valendo-se do teorema que assegura que a representação adjunta da eq. (222) contém os mesmos fatores de combinação, neste caso, \mathcal{C}_μ^A , temos:

$$i\mathcal{R}^{-1}\partial_\mu\mathcal{R} = \mathcal{C}_\mu^A M_A, \quad (247)$$

onde $M_A|_{BC} = i\bar{f}_{ABC}$. Notemos, então, que:

$$\langle u_B, \partial_\mu u_C \rangle = \mathcal{R}^{-1}\partial_\mu\mathcal{R}|_{BC} = -i\mathcal{C}_\mu^A M_A|_{BC} = -\bar{f}_{ABC} \mathcal{C}_\mu^A. \quad (248)$$

Enquanto isso, a partir da eq. (246), obtemos a relação:

$$\langle u_C, \partial_\mu u_A \wedge \partial_\nu u_B \rangle = \langle u_C, u_{A'} \wedge u_{B'} \rangle \langle u_{A'}, \partial_\mu u_A \rangle \langle u_{B'}, \partial_\nu u_B \rangle. \quad (249)$$

Aplicando no produto $u_{A'} \wedge u_{B'}$ do primeiro termo a eq. (241), e nos dois últimos, a eq. (248) que acabamos de desenvolver usando a representação adjunta, chegamos a:

$$\langle u_C, \partial_\mu u_A \wedge \partial_\nu u_B \rangle = iM_A M_C M_B|_{DE} C_\mu^D C_\nu^E. \quad (250)$$

Os índices A , B e C de u_A , u_B e u_C são os índices que representam as transformadas dos geradores diagonais, logo $A, B, C = \{1, \dots, N-1\}$. Portanto,

podemos aplicar, dos dois lados, três $(N - 1)$ -tuplas $\vec{\beta}|^A \vec{\beta}|^B \vec{\beta}|^C$, de modo que os termos, sendo o índice de soma mudo, podem ser definidos conjuntamente por:

$$\vec{\beta}|^A M_A = \vec{\beta}|^B M_B = \vec{\beta}|^C M_C = \vec{\beta}|^q M_q \equiv \vec{\beta}|_N \cdot \vec{M} \quad (251)$$

e

$$\vec{\beta}|^A u_A = \vec{\beta}|^B u_B = \vec{\beta}|^C u_C = \vec{\beta}|^q u_q \equiv P_\beta, \quad (252)$$

onde q é um índice genérico que indica os geradores da álgebra de Cartan, – notação que havíamos usado anteriormente. Substituindo estas duas definições na eq. (250):

$$\langle P_\beta, \partial_\mu P_\beta \wedge \partial_\nu P_\beta \rangle = i(\vec{\beta}|_N \cdot \vec{M})^3 |_{DE} C_\mu^D C_\nu^E. \quad (253)$$

O $\vec{\beta}|_N$ é a $(N - 1)$ -tupla que contém os pesos magnéticos, que se relacionam com os pesos fundamentais $\vec{\omega}_i$ de acordo com a eq. (236), e que também possuem, portanto, a propriedade (ver [30]):

$$(\vec{\beta}|_N \cdot \vec{M})^3 = \vec{\beta}|_N \cdot \vec{M}. \quad (254)$$

Finalmente, aplicando esta propriedade na eq. (253), tal que $\vec{\beta}|_N \cdot \vec{M}|_{DE} = \vec{\beta}|^q M_q|_{DE} = \vec{\beta}|^q f_{qDE}$, encontramos:

$$\langle P_\beta, \partial_\mu P_\beta \wedge \partial_\nu P_\beta \rangle = -\vec{\beta}|^q \bar{f}_{qDE} C_\mu^D C_\nu^E = -\vec{\beta}|^q H_{\mu\nu}^q(\mathcal{C}), \quad (255)$$

sendo $H_{\mu\nu}^q(\mathcal{C})$ exatamente o único elemento que contribui para a fase geométrica após descartarmos o puro calibre. Assim, a fase geométrica $\gamma_q = \vec{\beta}|^q \phi_q$ em evoluções cíclicas pode ser reescrita na forma:

$$\gamma_g(\tau) = \frac{1}{4N} \oint_{S(\Gamma)} dS_{\mu\nu} \langle P_\beta, \partial_\mu P_\beta \wedge \partial_\nu P_\beta \rangle, \quad (256)$$

onde $P_\beta = \vec{\beta}|^q u_q$, $q = \{1, \dots, N - 1\}$.

Esta é a generalização que procurávamos. O elemento P_β carrega os $N - 1$ vetores de Bloch que habitam um espaço de $N^2 - 1$ dimensões. A integração é feita sobre a superfície $dS_{\mu\nu}$, conforme os $2(N - 1)$ parâmetros do estado de um sistema de N níveis. Para um sistema de dois níveis, a expressão cai naturalmente na eq. (90): os únicos parâmetros serão os ângulos $\xi^\mu = \{\theta, \phi\}$, enquanto o produto vetorial em três dimensões, devido a dimensão das evoluções $SU(2)$, aparecerá pelo fator de estrutura ε_{ijk} , o tensor de Levi-Civita. A generalização é uma representação da fase geométrica por

monopolos que habitam o espaço de estados. Os objetos geométricos correspondentes estão implícitos nos monopolos.

Na realidade, o único vetor de Bloch cujas rotações são sentidas pela fase geométrica é o vetor oriundo da transformada do gerador T_{N-1} , visto que o único elemento não nulo de $\vec{\beta}_N$ é $\vec{\beta}_N|^{N-1}$. Usando $u_{N-1} = \vec{\alpha}_{N-1} \cdot \vec{T}$,

$$P_\beta = \beta_N|^{N-1} \Omega T_{N-1} \Omega^{-1} = -\sqrt{2(N-1)} \vec{\alpha}_{N-1} \cdot \vec{T}. \quad (257)$$

Para um sistema de dois níveis, sendo \hat{n} o vetor de Bloch e $\vec{\sigma}$ as matrizes de Pauli, a representação fundamental fornece:

$$u_{N-1} = \Omega \frac{\sigma_z}{2\sqrt{2}} \Omega^{-1} = \frac{1}{2\sqrt{2}} \hat{n} \cdot \vec{\sigma},$$

deste modo,

$$P_\beta[SU(2)] = -\frac{\sqrt{2}}{2\sqrt{2}} \hat{n} \cdot \vec{\sigma} = -\frac{1}{2} n^a \sigma_a, \quad a = \{1, 2, 3\}. \quad (258)$$

Então, pela definição de produto da eq. (240):

$$\partial_\mu P_\beta \wedge \partial_\nu P_\beta = -i \partial_\mu n^a \partial_\nu n^b \left[\frac{\sigma_a}{2}, \frac{\sigma_b}{2} \right] = \frac{1}{2} \partial_\mu n^a \partial_\nu n^b \epsilon_{abc} \sigma_c;$$

Por conseguinte,

$$\langle P_\beta, \partial_\mu P_\beta \wedge \partial_\nu P_\beta \rangle = -2 \epsilon_{abc} \partial_\mu n^a \partial_\nu n^b n^k \left\langle \frac{\sigma_k}{2\sqrt{2}}, \frac{\sigma_c}{2\sqrt{2}} \right\rangle = -2 \epsilon_{abc} \partial_\mu n^a \partial_\nu n^b n^k \delta_{kc};$$

ou seja,

$$\langle P_\beta, \partial_\mu P_\beta \wedge \partial_\nu P_\beta \rangle = -2 n^c \epsilon_{abc} \partial_\mu n^a \partial_\nu n^b. \quad (259)$$

Reconhecendo a componente do produto vetorial

$$\partial_\mu n^a \times \partial_\nu n^b |_{\hat{c}} = \epsilon_{abc} \partial_\mu n^a \partial_\nu n^b,$$

então

$$\langle P_\beta, \partial_\mu P_\beta \wedge \partial_\nu P_\beta \rangle = -2 \hat{n} \cdot \partial_\mu \hat{n} \times \partial_\nu \hat{n}. \quad (260)$$

Na integração no espaço de estados, o elemento de área $dS_{\theta\phi} = d\theta d\phi$ é antissimétrico: $dS_{\theta\phi} = -dS_{\phi\theta}$. E assim, usando também a propriedade antissimétrica do produto vetorial, temos a soma de dois termos iguais que fazem aparecer outro fator 2, donde, com o fator $4N = 8$ no denominador, encontramos a expressão conhecida:

$$\gamma_g(\tau) = \frac{1}{2} \int_{S(\Gamma)} d\theta d\phi \hat{n} \cdot \partial_\theta \hat{n} \times \partial_\phi \hat{n}.$$

No caso mais geral, chamando todos os fatores advindos da $(N - 1)$ -tupla $\vec{\beta} |^q$ e da representação fundamental de $\frac{1}{g_N}$, o integrando da fase geométrica, denotando as componentes α_{N-1}^j do vetor de Bloch $\vec{\alpha}_{N-1}$ simplesmente de α^j , será:

$$\frac{1}{g_N} \alpha^c f_{abc} \partial_\mu \alpha^a \partial_\nu \alpha^b. \quad (261)$$

Nesta expressão, a generalização mencionada fica explícita. Se antes, no sistema de dois níveis, o produto vetorial aparecia devido a constante de estrutura ser o tensor de Levi-Civita, agora, para um caso geral, temos a constante de estrutura f_{abc} , com o vetor de Bloch $\vec{\alpha}_{N-1}$ fazendo o papel do $\hat{n}(\theta, \phi)$, promovendo rotações em um espaço de $N^2 - 1$ dimensões. Desta forma, a generalização da fase geométrica por monopolos e a sua interpretação no espaço de estados é diretamente associada à estrutura algébrica do sistema.

Num sistema de três níveis, o vetor de Bloch a ser considerado é o $\vec{\alpha}_2$, com as oito componentes expostas no Apêndice 1. O tensor de Levi-Civita produzia 6 elementos, que compunham as componentes do produto vetorial, agora, o f_{abc} para os elementos independentes não nulos – f_{123} , f_{147} , f_{165} , f_{246} , f_{257} , f_{345} e f_{276} – produz 42 elementos. A atuação dos monopolos no espaço projetivo de estados torna-se cada vez mais extensa, enquanto a interpretação geométrica dos mesmos e a associação destes com os objetos geométricos projetados no espaço de estados pode ser pensada sobre cada termo da combinação linear, e na relação que eles mantêm com P_β , responsável por produzir os monopolos.

8 Conclusões

O estudo da fase geométrica tornou-se essencial para o entendimento e a descrição de efeitos de interferência na computação quântica. A manipulação bem sucedida de qubits aumentou a expectativa para o desenvolvimento de novas ideias que lançassem luz sobre o problema, com uma abordagem que generalizasse os conceitos conhecidos. Neste sentido, a análise da fase para sistemas com mais de dois níveis é imprescindível. O comportamento de cada partícula em sistemas de N níveis se refletirá nos resultados esperados para sistemas emaranhados formados não apenas por qubits.

Nesta tese, generalizamos a fase geométrica por uma representação por monopolos, que abre espaço para a aplicação de todo o maquinário das teorias que descrevem monopolos segundo os modelos de Yang-Mills-Higgs. A matemática em questão é estritamente a mesma, agora para os monopolos

atuando no espaço projetivo de estados. A partir desta representação, podemos esclarecer, por meio de paralelos e analogias, a origem destes em um contexto maior, que nos permitirá prever novos efeitos, e reconhecer quais configurações de sistemas físicos e ferramentas matemáticas advindas do modelo serão úteis para explicar os fenômenos.

Aliado a tudo isto, demonstramos que os estados quânticos da teoria são invariantes por transformações $U^{N-1}(1)$, que representam uma extensão da invariância de gauge. Tais transformações são determinadas pelos vetores análogos de Bloch $\vec{\alpha}_i$, que habitam um espaço de $N^2 - 1$ dimensões, a dimensão da álgebra, oriundos da aplicação da transformada aos geradores da subálgebra de Cartan dada por $\mathcal{T}\{T_i\} = \Omega T_i \Omega^{-1}$, $i \in \{1, \dots, N-1\}$, sendo a matriz $\Omega = \Omega^{(N,N)}$ o coset $SU(N)/U(N-1)$ da decomposição da evolução temporal $SU(N)$ do sistema, descontada a fase $e^{if(t)}$ da invariância de gauge inerente a todo estado que evolui por uma fase, de acordo com o formalismo de Mukunda-Simon.

Mostramos, em sequência, que a mesma transformada produz os análogos de Bloch que formam os monopolos no espaço projetivo de um sistema de N níveis, analogamente ao caso do sistema de dois níveis, no qual a fase geométrica pode ser associada à presença de um monopolo, composto pelo vetor de Bloch \hat{n} , $\hat{n} \in S^2$, produzido pela transformada da matriz de Pauli σ_z , $\mathcal{T}\{\sigma_z\}$. De fato, o único análogo de Bloch cujas rotações são sentidas pela fase geométrica é $\vec{\alpha}_{N-1}$, oriundo da transformada $\mathcal{T}\{T_{N-1}\}$, sendo T_{N-1} o gerador $N-1$ da subálgebra de Cartan na representação fundamental.

Os P_β 's, que definimos pela combinação linear entre os pesos magnéticos e a transformada dos geradores da álgebra, são responsáveis por gerar o análogo do vetor de Bloch $\vec{\alpha}_{N-1}$ e cancelar a contribuição dos demais para a fase geométrica. O P_β contém, portanto, a informação sobre as rotações do único vetor de Bloch que define a fase geométrica, além de determinar a estrutura algébrica do sistema, fazendo aparecer a constante de estrutura na combinação linear que caracteriza a generalização por monopolos. Compete, a partir deste ponto, entendermos a relação recíproca que existe entre P_β , a estrutura algébrica e os objetos geométricos projetados no espaço de estados, para então ampliarmos a compreensão da física envolvida.

Apêndices

Apêndice 1

Para um sistema de três níveis, a transformada do segundo gerador da álgebra de Cartan, $\Omega^{(3,3)}T_2\Omega^{(3,3)\dagger} = \vec{\alpha}_2 \cdot \vec{T}$, sendo $\vec{\alpha}_2 = (\alpha_2^{(1)}, \alpha_2^{(2)}, \dots, \alpha_2^{(8)})^T$ associados à base dos geradores na mesma ordem atribuída a $\vec{\alpha}_1$ pela eq. (116), fornece os parâmetros:

$$\alpha_2^{(1)} = \frac{2(\gamma_2^4 - \gamma_1^4) + (\gamma_1^4 - \gamma_2^4)(2 \cos^2 \gamma^{(2)} - \sin^2 \gamma^{(2)})}{2\sqrt{3}\gamma^{(2)4}};$$

$$\alpha_2^{(2)} = \frac{2 \cos^2 \gamma^{(2)} - \sin^2 \gamma^{(2)}}{2};$$

e, usando os fatores:

$$A_2 = \frac{\gamma_1\gamma_2(\cos \gamma^{(2)} - 1)}{\gamma^{(2)2}} \left[2 + \frac{(\gamma_1^2 + \gamma_2^2)(\cos \gamma^{(2)} - 1)}{\gamma^{(2)2}} \right] - 2 \frac{\gamma_1\gamma_2 \sin^2 \gamma^{(2)}}{\gamma^{(2)2}},$$

$$B_2 = - \left[1 + \frac{\gamma_1^2(\cos \gamma^{(2)} - 1)}{\gamma^{(2)2}} \right] \frac{\gamma_1 \sin \gamma^{(2)}}{\gamma^{(2)}} - \frac{\gamma_1\gamma_2^2(\cos \gamma^{(2)} - 1) \sin \gamma^{(2)}}{\gamma^{(2)3}} - 2 \frac{\gamma_1 \sin \gamma^{(2)} \cos \gamma^{(2)}}{\gamma^{(2)}},$$

$$C_2 = - \left[1 + \frac{\gamma_2^2(\cos \gamma^{(2)} - 1)}{\gamma^{(2)2}} \right] \frac{\gamma_2 \sin \gamma^{(2)}}{\gamma^{(2)}} - \frac{\gamma_1^2\gamma_2(\cos \gamma^{(2)} - 1) \sin \gamma^{(2)}}{\gamma^{(2)3}} - 2 \frac{\gamma_2 \sin \gamma^{(2)} \cos \gamma^{(2)}}{\gamma^{(2)}},$$

os outros parâmetros são:

$$\alpha_2^{(3)} = \frac{A_2}{\sqrt{3}} \cos(\xi_1 - \xi_2), \quad \alpha_2^{(4)} = -\frac{A_2}{\sqrt{3}} \sin(\xi_1 - \xi_2);$$

$$\alpha_2^{(5)} = \frac{B_2}{\sqrt{3}} \cos \xi_1, \quad \alpha_2^{(6)} = -\frac{B_2}{\sqrt{3}} \sin \xi_1;$$

$$\alpha_2^{(7)} = \frac{C_2}{\sqrt{3}} \cos \xi_2, \quad \alpha_2^{(8)} = -\frac{C_2}{\sqrt{3}} \sin \xi_2; \quad (262)$$

sendo γ_1 , γ_2 , ξ_1 e ξ_2 os parâmetros da parametrização da decomposição canônica, e $\gamma^{(2)}$ com a mesma definição que lhe foi atribuída.

Apêndice 2

Teorema de Stokes generalizado. Para a integração de funções 1-forma, necessitamos dos seguintes axiomas das derivadas exteriores de funções suaves f (funções que possuem derivadas de qualquer ordem em qualquer região do domínio):

- 1) df é a derivada da função suave f ;

2) $d(df) = 0$ para qualquer função suave f .

Dos axiomas acima, segue-se que $d(A dx) = dA dx$, visto que $d^2x = 0$. Defini-se a derivada exterior da 1-forma ω sobre o \mathcal{R}^n como a 2-forma $d\omega$, ou seja, dada a 1-forma

$$\omega = \sum_{\mu=1}^n A_{\mu} dx^{\mu}, \quad (263)$$

sendo $A_{\mu} = A_{\mu}(x^1, \dots, x^n)$, temos a derivada exterior:

$$d\omega = \sum_{\mu=1}^n \sum_{\nu=1}^n \frac{\partial A_{\mu}}{\partial x^{\nu}} dx^{\nu} \wedge dx^{\mu}; \quad (264)$$

sendo o produto exterior $dx^{\nu} \wedge dx^{\mu}$ dotado da propriedade antissimétrica

$$dx^{\nu} \wedge dx^{\mu} = -dx^{\mu} \wedge dx^{\nu}, \quad (265)$$

que, na integração de 1-formas sobre segmentos orientados, contém a informação sobre a orientação de cada divisão infinitesimal da região, promovendo os cancelamentos internos das bordas que saem naturalmente das integrações, sendo esta propriedade os seus correspondentes algébricos. (Desta propriedade, segue-se que $dx^{\mu} \wedge dx^{\mu} = 0$.)

Se pensarmos a integração de uma k -forma em R^n sobre uma borda ∂S_i de um $(k+1)$ -paralelepípedo infinitesimal S_i de dimensão $k+1$, ao tomarmos a variedade S (suave, compacta e orientável) de borda ∂S como a soma de pequenas partes S_i , os cancelamentos das bordas internas ∂S_i orientadas no mesmo sentido asseguram que, no limite da soma de integrais definidas,

$$\int_{\partial S} \omega = \sum_i \int_{\partial S_i} \omega = \sum_i \int_{S_i} d\omega = \int_S d\omega,$$

enfim, o teorema de Stokes propriamente dito (ver [32]):

$$\int_{\partial S} \omega = \int_S d\omega. \quad (266)$$

No caso da integração de 1-formas, S é uma superfície bidimensional e $\partial S = C$, um caminho fechado. (Os 2-paralelepípedos infinitesimais seriam, por definição, retângulos.) Pelas eq's (263) e (264), assumindo a convenção de Einstein para $A_{\mu}(x^1, \dots, x^n)$,

$$\oint_C A_{\mu} dx^{\mu} = \int_S \partial_{\nu} A_{\mu} dx^{\nu} \wedge dx^{\mu}. \quad (267)$$

Podemos decompor $\partial_\nu A_\mu$ em dois tensores, um simétrico e outro antissimétrico,

$$\partial_\nu A_\mu = \frac{1}{2}(\partial_\nu A_\mu + \partial_\mu A_\nu) + \frac{1}{2}(\partial_\nu A_\mu - \partial_\mu A_\nu),$$

mas o somatório em μ e ν do produto entre um tensor simétrico $S_{\mu\nu}$ e outro antissimétrico $A^{\mu\nu}$ é nulo, e o teorema de Stokes para a integração de 1-formas pode ser reescrito:

$$\oint_C A_\mu dx^\mu = \frac{1}{2} \int_S (\partial_\nu A_\mu - \partial_\mu A_\nu) dx^\nu \wedge dx^\mu. \quad (268)$$

Ao longo do texto, usaremos a definição corriqueira da orientação positiva como sendo aquela que, partindo da origem, percorre o eixo positivo de x^ν até um ponto $(x_1^\nu, \dots, x_n^\nu)$, com $x_i^\nu > 0$, saindo deste até um outro ponto no eixo positivo de x^μ , $(x_1^\mu, \dots, x_n^\mu)$, com $x_i^\mu > 0$ e $\mu > \nu$, retornando assim à origem. A orientação da superfície segue a regra da mão direita.

Apêndice 3

Pela definição do tensor densidade de campo $F_{\mu\nu}(B)$ dada pela eq. (227), para $\mathcal{C}_\mu^A T_A = \mathcal{C}_\mu$:

$$F_{\mu\nu}(\mathcal{C}) = \partial_\mu \mathcal{C}_\nu - \partial_\nu \mathcal{C}_\mu - i[\mathcal{C}_\mu, \mathcal{C}_\nu]; \quad (269)$$

substituindo $\mathcal{C}_\mu = i\Omega^{-1}\partial_\mu\Omega$ nos dois primeiros termos:

$$\partial_\mu \mathcal{C}_\nu - \partial_\nu \mathcal{C}_\mu = i\{\partial_\mu \Omega^{-1}\partial_\nu \Omega + \Omega^{-1}\partial_\mu \partial_\nu \Omega - \partial_\nu \Omega^{-1}\partial_\mu \Omega - \Omega^{-1}\partial_\nu \partial_\mu \Omega\};$$

substituindo agora no comutador, usando $\Omega^{-1}\partial_\mu\Omega = -\partial_\mu\Omega^{-1}\Omega$ obtida pela derivação de $\Omega^{-1}\Omega = 1$:

$$-i[\mathcal{C}_\mu, \mathcal{C}_\nu] = i\Omega^{-1}\partial_\mu\Omega\Omega^{-1}\partial_\nu\Omega - i\Omega^{-1}\partial_\nu\Omega\Omega^{-1}\partial_\mu\Omega = -i\{\partial_\mu\Omega^{-1}\partial_\nu\Omega - \partial_\nu\Omega^{-1}\partial_\mu\Omega\}.$$

Somando as duas últimas equações na eq. (269):

$$F_{\mu\nu}(\mathcal{C}) = i\Omega^{-1}[\partial_\mu, \partial_\nu]\Omega = 0. \quad (270)$$

Desta forma, fica demonstrada a eq. (231), já que $F_{\mu\nu}(\mathcal{C}) = F_{\mu\nu}^q(\mathcal{C})T_q = 0$ se, e somente se, $F_{\mu\nu}^q(\mathcal{C}) = 0$.

Referências

- [1] M. V. Berry, Proc. R. Soc. London Ser. A **392**, 45 (1984).
- [2] S. Pancharatnam, Proc. Indian Acad. Sci. A **44**, 247 (1956).

- [3] Y. Aharonov and D. Bohm, *Phys. Rev.* **158**, 1237-1238 (1967).
- [4] Y. Aharonov and J. Anandan, *Phys. Rev. Lett.* **58** 1593-1596 (1987).
- [5] N. Mukunda and R. Simon, *Annals of Physics*, **228** (1993) 205.
- [6] N. Mukunda and R. Simon, *Annals of Physics*, **228** (1993) 269.
- [7] M.V. Berry, *The geometric phase*, *Scientific American*, 259 (6), 26-34 (1988).
- [8] E. Sjöqvist, *Phys. Rev.* **A62**, 022109 (2000).
- [9] B. Hessmo and E. Sjöqvist, *Phys. Rev.* **A62**, 062301 (2000).
- [10] P. Milman and R. Mosseri, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 203901 (2003).
- [11] P. Milman, *Phys. Rev.* **A73**, 062118 (2006).
- [12] C. E. R. Souza, J. A. O. Huguenin, P. Milman, and A. Z. Khoury, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 160401 (2007).
- [13] J. Du, J. Zhu, M. Shi, X. Peng, and D. Suter, *Phys. Rev.* **A76**, 042121 (2007).
- [14] M. Johansson, A. Z. Khoury, K. Singh and E. Sjöqvist, *Phys. Rev.* **A87**, 042112 (2013).
- [15] L. E. Oxman and A. Z. Khoury, *Phys. Rev.* **A89**, 032106 (2014).
- [16] K. S. Mallesh and N. Mukunda, *A generalized Pancharatnam geometric phase formula for three level quantum systems*, arXiv:9605042v1, 1996.
- [17] S. Vinjanampathy and A. R. P. Rau, *Bloch sphere like construction of $SU(3)$ Hamiltonians using Unitary Integration*, arXiv:0906.1259v1, 2009.
- [18] S. Abdel-Khalek, Y. S. El-Saman and M. Abdel-Aty, *Geometric phase of a moving three-level atom*, 0912.4851v1, 2009.
- [19] E. Sjöqvist, A. K. Pati, A. K. Ekert, J. S. Anandan, M. Ericsson, D. K. L. Oi and V. Vedral, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 2845 (2000).
- [20] J. A. Jones, V. Vedral, A. Ekert and G. Castagnoli, *Nature (London)* **403** 869 (2000).
- [21] L. M. Duan, J. I. Cirac and P. Zoller, *Science* **292** (2001) 1695.

- [22] M. Born and V. Fock, *Zeitschrift für Physik* **51**, 165 (1928).
- [23] A. Messiah, *Quantum mechanics*, 1962, Vol. 2, Amsterdam: North-Holland.
- [24] R. G. Chambers, *Phys. Rev. Lett.* **5**, 3-5 (1960).
- [25] V. Rubakov, *Classical Theory of Gauge Fields*, 2002, Princeton University Press, cap. 3.
- [26] K. Gottfried and T. Yan, 2004, *Quantum Mechanics: Fundamentals* 2^a ed. Springer, New York, págs.'s 447 e 448.
- [27] R. Rajaraman, *Solitons and Instantons* (Elsevier Science, 1987).
- [28] R. Gilmore, *Lie Groups, Lie Algebras, and Some of Their Applications* (John Wiley Pub Publishing Co., 1974).
- [29] S. J. Akhtarshenas, *Differential geometry on $SU(N)$: Left and right invariant vector fields and one-forms*, arXiv:1003.2708, 2010.
- [30] L. E. Oxman and A. Z. Khoury, *Non Abelian structures and the geometric phase of entangled qubits*, arXiv:1406.4209, 2014.
- [31] L. E. Oxman, *J. High Energy Phys.* **03** (2013) 038.
- [32] C. Nash and S. Sen, *Topology and Geometry for Physicists* (Academic Press, 1983).

Referências de figuras

Fig. 3: *Magnetic Skyrmion*. Digital Image. Web 12 Feb 2016.

<<http://www2.yukawa.kyoto-u.ac.jp/nqs2011/archive/PresenFiles/WS-D/1130/Rosch.pdf>>.

Fig. 4: *Berry phase and its sign in quantum superposition states of thermal $87Rb$ atoms*. H. Helm and S. Welte. *PhysRevA*.89.023412. Digital Image.

Web 12 Fev 2016.

<https://www.researchgate.net/publication/262950118>>.

Fig. 6: *Poincaré Conjecture and Homotopy*. Digital Image. Web 12 Fev 2016. <http://www.science4all.org/wp-content/uploads/2013/03/Non-Equivalent-Loops.png>>.

Fig. 7: *A homotopy from a circle around a sphere down to a single point*. Digital Image. Web 12 Fev 2016.

<https://commons.wikimedia.org/wiki/File:P1S2all.jpg>>.

Fig. 8 e Fig. 9: Digital Image. Web 13 Fev 2016. Wikipedia, Homotopy groups of spheres.